



Propiedades electrónicas de sistemas inconmensurados

Llois, Ana María
1985

Tesis Doctoral

Facultad de Ciencias Exactas y Naturales
Universidad de Buenos Aires

www.digital.bl.fcen.uba.ar

Contacto: digital@bl.fcen.uba.ar

Este documento forma parte de la colección de tesis doctorales de la Biblioteca Central Dr. Luis Federico Leloir. Su utilización debe ser acompañada por la cita bibliográfica con reconocimiento de la fuente.

This document is part of the doctoral theses collection of the Central Library Dr. Luis Federico Leloir. It should be used accompanied by the corresponding citation acknowledging the source.

Fuente / source:

Biblioteca Digital de la Facultad de Ciencias Exactas y Naturales - Universidad de Buenos Aires

UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES

PROPIEDADES ELECTRONICAS
DE
SISTEMAS INCONMENSURADOS

LIC. ANA MARÍA LLOIS

DIRECTOR DE TESIS: DRA. MARIANA WEISSMANN

TESIS PRESENTADA PARA OPTAR AL TITULO DE
DOCTOR EN FISICA

- 1985 -

-1886-
y.2

AGRADECIMIENTOS

Deseo expresar mi agradecimiento, en primer lugar, a la Dra. Mariana Weissmann, mi directora de Tesis, quien además de sugerir el tema de estas investigaciones, brindó su apoyo, experiencia e ideas en todas las etapas de elaboración de este trabajo.

A la Dra. Norah V. Cohan, quien me inició en el trabajo de investigación y quien, conjuntamente con la Dra. Weissmann, sugirió el tema de este trabajo y participó de la mayor parte de las etapas de realización del mismo.

Al Dr. Eduardo Caselli por haberme brindado apoyo y asesoramiento.

A la Lic. Estela Manghi porque en varias oportunidades me proporcionó bibliografía, entre otros, los trabajos de Aubry.

A la Dra. M. de Benyacar y al Dr. H. Bonadeo por haberme brindado la oportunidad de llevar a cabo este trabajo de investigación en la División Física del Sólido de la CNEA.

Al Dr. J.F. Weisz y a los Licenciados H. Pastawsky y C. Slutzky por interesantes y útiles discusiones que hemos tenido, especialmente, en las Reuniones de la Asociación Física Argentina.

A los miembros de la División Física del Sólido de la Comisión Nacional de Energía Atómica, por hacer de éste un lugar de trabajo agradable.

Al dibujante Luis Merino, porque con interés y eficiencia hizo los gráficos de esta Tesis y a Silvia Alvarez del Depto. de Información Técnica del CAC, por haberme tenido paciencia y trabajar laboriosamente en la impresión del trabajo.

Deseo, finalmente, agradecer al CONICET por el apoyo económico brindado para la realización de este trabajo de investigación, a través de su programa de Becas Internas.

INDICE

<u>Capítulo</u>		Pág.
I	<u>Introducción</u>	1
II	<u>Modelos inconmensurados unidimensionales: Su densidad de estados</u>	8
II.1	Introducción	8
II.2	Modelos inconmensurados estudiados	8
II.3	Cálculo de la densidad de estados para los distintos modelos	16
II.4	Distribución de los estados electrónicos en bandas y minibandas	20
II.4.1	Proporción de los estados en las bandas principales	20
II.4.2	Proporción de los estados en las minibandas	23
II.5	Ejemplo del $\text{Hg}_3-\delta\text{AsF}_6$. Cálculo aproximado del potencial en la cadena unidimensional de Hg	26
II.6	Conclusiones	31
III	<u>Introducción de desorden en los sistemas inconmensurados unidimensionales</u>	32
III.1	Introducción	32
III.2	Modelos de desorden	33
III.3	Cálculo de las densidades de estados.	35
III.4	Conclusiones	42
IV	<u>Modelo unidimensional con solitones: Su densidad de estados</u>	43
IV.1	Introducción	43
IV.2	Cálculo de las posiciones de equilibrio de los átomos	46
IV.3	Cálculos de la densidad de estados	51

V	<u>Localización en sistemas inconmensurados unidimensionales</u>	57
V.1	Introducción	57
V.2	Factor de crecimiento exponencial $\gamma(E)$: Medida de la localización	59
V.2.1	$\gamma(E)$ para un sistema unidimensional ordenado	59
V.2.2	$\gamma(E)$ para un sistema no periódico	61
V.3	Método para el cálculo de $\gamma(E)$	63
V.4	Resultados	64
V.5	Conclusiones	71
VI	<u>Sistema unidimensional con solitones: Localización</u>	73
VI.1	Introducción	73
VI.2	Modelo usado	74
VI.3	Cálculos y resultados	75
VI.3.1	Localización	75
VI.3.2	Distribución de la carga en los sistemas con solitones	75
VII	<u>Sistemas inconmensurados bidimensionales: Su densidad de estados</u>	80
VII.1	Introducción	80
VII.2	Modelos bidimensionales: Cadenas en fase y en antifase	80
VII.3	Método de cálculo de la densidad de estados	85
VII.4	Cálculos y resultados para los distintos modelos	88
VII.5	Densidad de estados de una cinta	96
VII.6	Densidad de estados de dos ejemplos tridimensionales	98
VII.7	Comparación de la densidad de estados del grafito y de la red cuadrada inconmensurados en una dirección	100
VII.8	Conclusiones	104

	Pág.
VIII <u>Localización en sistemas inconmensurados bidimensionales</u>	106
VIII.1 Introducción	106
VIII.2 Búsqueda de la autodualidad en los sistemas bidimensionales	107
VIII.2.1 Modelo en fase inconmensurado según una dirección	107
VIII.2.2 Modelo en antifase inconmensurado según una dirección	112
VIII.2.3 Autodualidad en los sistemas inconmensurados según dos direcciones	114
VIII.3 Estudio de la localización en los sistemas inconmensurados de más de una dimensión	117
VIII.4 Cálculos y resultados	123
VIII.4.1 Diagonalización directa	123
VIII.4.2 Método de la matriz transferencia	129
VIII.5 Conclusiones	137
IX <u>Resumen y conclusiones</u>	140
Apéndice I	145
Apéndice II	147
Referencias	150

CAPITULO I

INTRODUCCION

En los últimos años se ha encontrado que numerosos materiales sólidos presentan, en un rango dado de temperatura o presión, una fase con características muy peculiares. Esta fase se origina por la existencia simultánea de dos o más periodicidades inconmensuradas entre sí, es decir, tales que el cociente entre sus dos períodos es un número irracional. A veces, esto sucede en una sola dirección cristalográfica, perdiéndose el orden translacional según esa dirección, pero preservándose en las restantes. También puede perderse el orden translacional en más de una dirección. Estos materiales tienen en común con los sistemas desordenados la falta de periodicidad, pero contrariamente a lo que sucede con éstos, en los cuales los átomos vecinos tienen entornos total o parcialmente independientes entre sí, en los inconmensurados hay una relación unívoca entre el campo que ve un átomo y el que ven sus vecinos.

Entre los cristales que presentan fases inconmensuradas encontramos, por ejemplo, que el α -Uranio por debajo de 43°K es inconmensurado según dos direcciones cristalinas⁽¹⁾, los cristales Rb_2ZnCl_4 , K_2ZnCl_4 , Rb_2ZnBr_4 ⁽²⁾, etc, todos tienen una fase inconmensurada a lo largo del eje c. Las cadenas de Hg en el compuesto $\text{Hg}_{3-8}\text{AsF}_6$, que es un conductor cuasi-unidimensional, tienen la distancia entre dos mercurios inconmensurada con la estructura de la red de los grupos de AsF_6 ⁽³⁾. Otros sistemas que presentan estructuras moduladas y que son conocidos por su carácter altamente unidimensional son, por ejemplo, los complejos de tetracianuro de platino y bioxalato de platino⁽⁴⁾.

Se pueden presentar esencialmente dos tipos de cristales inconmensurados, que se ilustran en la figura I.1:

a) **Inconmensuración de composición :**

En este caso la constante de red de los átomos negros en la fig. I.1(a) es inconmensurada con respecto a la constante de red de los átomos representados por círculos en la mencionada figura. Por ejemplo, estructuras como las de $\text{Hg}_{3-\delta}\text{AsF}_6$ presentan este tipo de inconmensuración. La distancia entre átomos del mismo tipo es constante y el campo que cada uno ve debido al resto del cristal es modulado.

b) **Inconmensuración de desplazamiento :**

En este caso las posiciones de equilibrio de los átomos, indicadas por círculos en línea cortada en la fig. I.1(b), están desviadas levemente de las posiciones ocupadas por átomos negros que forman una red perfecta. En este caso, entonces, la distancia entre átomos no es constante, contiene una modulación, cuyo período es inconmensurado con la constante de la red en la fase normal. Sistemas de este tipo son, por ejemplo, aquellos que poseen una onda de densidad de carga (CDW) en compuestos cuasi uni- o bidimensionales. Peierls⁽⁵⁾ y Froelich⁽⁶⁾ mostraron en los años 50 que en conductores unidimensionales una modulación espacial de la densidad electrónica, con vector de onda exactamente igual al doble del vector de Fermi, k_F , es energéticamente favorable. Entonces, dependiendo de k_F , es posible que la CDW dé origen a una inconmensuración de desplazamiento de los átomos de la red.

Estos dos tipos de inconmensuración pueden ser descriptos como casos particulares de un modelo más general en el cual los desfasajes de los átomos con respecto a una distribución equidistante de los mismos están dados por una función tipo solitón, que resulta de resolver una ecuación tipo Sine-Gordon⁽⁷⁻⁹⁾. La mayoría de nuestros cálculos serán para sistemas del tipo (a).

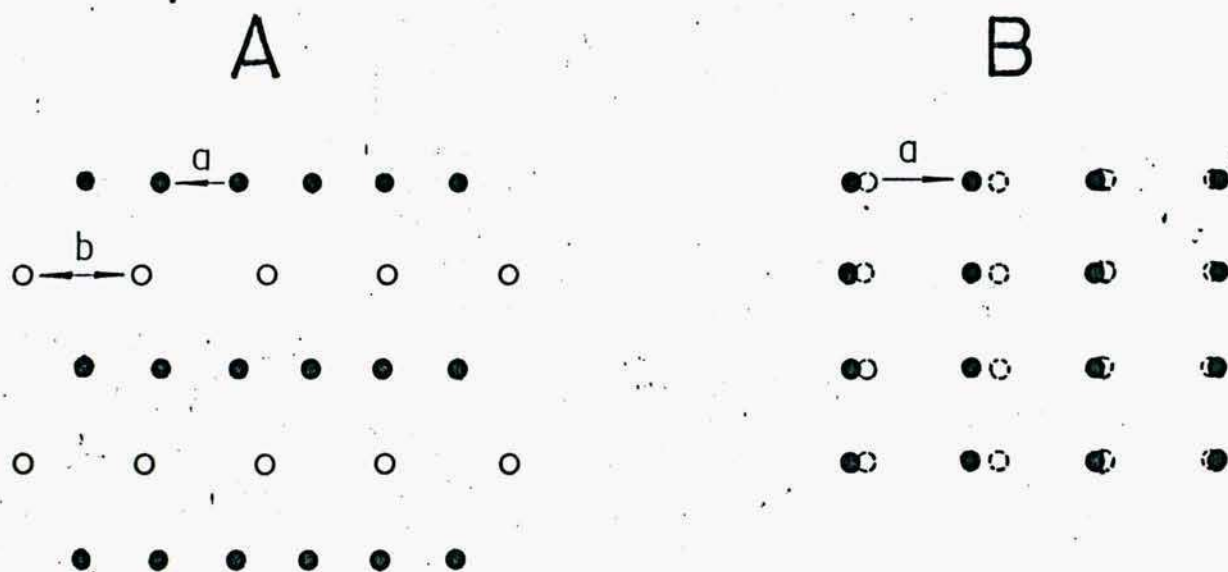


FIGURA I.1: Gráfico esquemático de ambos tipos de cristal incommensurado:

A) Incommensuración de composición: La periodicidad de la red formada por los átomos negros es incommensurada con respecto a la correspondiente a la de los átomos representados por círculos. a/b es un número irracional.

B) Incommensuración de desplazamiento: En este caso las posiciones de equilibrio de los átomos, representadas por círculos en línea cortada, están levemente desviadas con respecto a las posiciones representadas por la red de átomos negros. La desviación está dada por una modulación cuyo período es incommensurado con la periodicidad de la red sin modulación.

Desde un punto de vista teórico, los problemas derivados de la inconmensurabilidad son bastante intrigantes. Muchos conceptos sobre los cuales está basada la teoría del estado sólido han tenido que ser adaptados de manera no trivial. Desde el punto de vista de la simetría, la fase inconmensurada está caracterizada por no existir periodicidad del sistema en tres dimensiones, pero de Wolff, Janner, Janssen y de Lange han mostrado que introduciendo grupos espaciales en más de tres dimensiones, uno puede recuperar la periodicidad que se había perdido debido a la inconmensuración (10-14).

El primero en estudiar teóricamente potenciales cuasi-periódicos, o sea aquéllos que resultan de superponer dos o más periodicidades inconmensuradas entre sí, fue Peierls⁽⁵⁾ quien estudió el problema de un electrón en una red bidimensional con un campo magnético perpendicular a la misma. El Hamiltoniano de este problema, en la aproximación que desprecia la interacción entre electrones y entre bandas es equivalente al del problema unidimensional siguiente:

$$H\psi(n) = \psi(n+1) + \psi(n-1) + \Delta\alpha\cos(\rho n)\psi(n) \quad (1.1)$$

En esta ecuación los coeficientes $\psi(n)$ son los coeficientes de la función de onda de enlaces fuertes según la dirección "x", (campo magnético según z), dado que al elegir la medida de Landau (Landau gauge) para el sistema, resulta que según la dirección "y" la función de onda se comporta como una onda plana. ρ es igual a $(2\pi e/hc)a^2H$, siendo a la constante de red, H es el campo magnético y $\Delta\alpha=2$. A la ecuación (1.1) se la conoce como ecuación de Harper⁽¹⁵⁾ (ver Apéndice I) y resulta ser un caso particular del problema inconmensurado en una dimensión cuando $\rho/(2\pi)$ es un número irracional.

D. Hofstadter⁽¹⁶⁾ estudió la estructura del espectro de (1.1), encontrando que la misma tiene directa relación con la expansión en fracciones continuas del número irracional $\rho/(2\pi)$.

Se trata de un espectro con muchos gaps y minigaps, siendo la proporción de estados que posee cada banda y minibanda la que está relacionada con la expansión en fracciones continuas del número irracional.

Aubry y André (17) también estudiaron un modelo de uniones fuertes que tiene un Hamiltoniano de la misma forma que (1.1), con $\Delta\alpha$ variable. Encontraron que existe un valor crítico de $\Delta\alpha$ ($\Delta\alpha=2.$) por debajo del cual todos los estados son extendidos y por encima del cual todos son localizados, o sea que para ese valor crítico tendría lugar una transición metal-aislador en este modelo, siendo esta transición independiente del valor del número irracional, de la fase del coseno y de la energía. Otros trabajos estudian las limitaciones del modelo de Aubry y André y lo extienden (18-25). Se han estudiado también modelos más generales unidimensionales, en los cuales existen bordes de movilidad dependientes del número irracional y de la fase (26-31).

Si en lugar del coseno en (1.1) tenemos una modulación tipo tangente, la densidad de estados no tiene gaps y se torna idéntica a la de un sistema totalmente desordenado con distribución Lorentziana de los elementos de matriz (32,33).

Vemos, entonces, que los sistemas inconmensurados presentan características peculiares, que a diferencia de los sistemas cristalinos cuyos estados son siempre todos extendidos y de los desordenados cuyos estados están todos localizados en una dimensión, los inconmensurados unidimensionales pueden presentar una transición metal-aislador, tener bordes de movilidad o tener todos sus estados localizados, dependiendo del modelo elegido. Esto sugiere que los sistemas inconmensurados podrán ser más o menos parecidos a un sistema ordenado dependiendo del tipo de modulación.

En esta Tesis nos proponemos estudiar la dependencia de las propiedades electrónicas con el tipo de modulación y con el desorden para varios modelos unidimensionales inconmensurados.

También trataremos de acercarnos a sistemas reales, en los cuales las interacciones en las otras dos direcciones no son despreciables.

La Tesis está estructurada de la siguiente manera:

En el **CAPITULO II** estudiaremos la densidad de estados electrónica de sistemas unidimensionales de enlaces fuertes con interacciones entre primeros vecinos, sometidos a un potencial de modulación externo inconmensurado con el de la red. Compararemos las densidades de estado obtenidas para distintas formas funcionales de la modulación.

En el **CAPITULO III** introduciremos desorden en los sistemas inconmensurados con el propósito de estudiar el grado de aproximación de los mismos a un sistema totalmente desordenado dependiendo del tipo de modulación externa y del grado de inconmensuración.

El **CAPITULO IV** lo dedicaremos a calcular la densidad de estados para un modelo, también unidimensional, pero en el cual las posiciones de equilibrio de los átomos corresponden a un sistema con solitones.

En el **CAPITULO V** estudiaremos las propiedades de localización y presencia de bordes de movilidad en los sistemas inconmensurados unidimensionales mencionados.

En el **CAPITULO VI** calcularemos la distribución de carga en un sistema con solitones y estudiaremos la presencia de bordes de movilidad en este caso.

En el **CAPITULO VII** se presentarán distintos modelos de sistemas inconmensurados bidimensionales, todos en red cuadrada, se calcularán sus densidades de estado y además la densidad de

estados para la red de grafito inconmensurada según una dirección. Se comparará esta última con la densidad de estados obtenida al imponerle inconmensuración según una dirección a la red cuadrada.

En el **CAPITULO VIII** nos dedicaremos a estudiar las propiedades de localización de los modelos inconmensurados bidimensionales.

En el **CAPITULO IX** presentaremos un resumen y las conclusiones finales del trabajo.

CAPITULO II

Modelos inconmensurados unidimensionales:

Su densidad de estados

II.1 Introducción

El objeto de este capítulo es calcular densidades de estado de sistemas inconmensurados unidimensionales. Se estudiarán cuatro modelos en los cuales la inconmensuración se manifiesta a través de una modulación de los elementos diagonales del Hamiltoniano. Además de las modulaciones tipo coseno y tangente que ya fueron estudiadas en parte se introducirán otras dos, una función tipo zigzag, que se asemeja a la modulación tipo coseno por no poseer discontinuidades y una función diente de sierra, discontinua como la tangente. Estas dos modulaciones son no analíticas y ambas tienen la misma distribución uniforme para los elementos diagonales que el modelo de Anderson para sistemas desordenados⁽³⁴⁾.

II.2 Modelos inconmensurados estudiados

Hemos usado en todos los casos Hamiltonianos de uniones fuertes (tight-binding) que son útiles en física del estado sólido para describir electrones no interactuantes a temperatura cero. Los orbitales atómicos, que se usan como base, son funciones localizadas alrededor de la posición de cada átomo de la red, el solapamiento entre ellos se considera despreciable y la interacción decae tan rápidamente con la distancia, que se considera no nula tan sólo a la interacción entre primeros vecinos. Formalmente se tiene entonces:

a) Hamiltoniano de un electrón, que se escribe como la suma de la energía cinética y de los potenciales centrados en cada posición de la red

$$H = T + \sum_i V_i \quad (2.1)$$

b) Se toma como base, supuesta completa y ortogonal, al conjunto de orbitales atómicos ψ_{ik} , donde el subíndice i designa al átomo y k al orbital. Dado que en este trabajo consideramos un solo orbital por átomo, a partir de aquí se suprimirá el índice k . Los estados propios de H son combinaciones lineales de los orbitales atómicos:

$$\Psi(E) = \sum_i f_i \psi_i \quad (2.2)$$

c) Los elementos diagonales del Hamiltoniano son:

$$H_{ii} = \langle \psi_i | T + \sum_j V_j | \psi_i \rangle = E_0^i + E_1^i = \alpha(z_i) \quad (2.3)$$

en donde $E_0 = \langle \psi_i | T + V_i | \psi_i \rangle$ y z_i es la posición del i ésimo átomo de la cadena. Y para los elementos fuera de la diagonal tenemos:

$$H_{ij} \neq 0 \quad \text{si} \quad j = i \pm 1 \quad (2.4)$$

$H_{i,i+1} = t$ será la unidad de medida de las energías.

De las consideraciones anteriores surge que al operador H se lo puede escribir de la siguiente forma:

$$H = \sum_i \alpha(z_i) | \psi_i \rangle \langle \psi_i | + (1/2) \sum_{j=i \pm 1} t (| \psi_i \rangle \langle \psi_j | + | \psi_j \rangle \langle \psi_i |) \quad (2.5)$$

La ecuación de autovalores, $H\Psi = E\Psi$ se puede escribir de la siguiente manera:

$$t(f_{n+1} + f_{n-1}) + \alpha(z_n)f_n = Ef_n \quad (2.6)$$

donde $t = \langle \Psi_i | H | \Psi_{i+1} \rangle = \langle \Psi_i | H | \Psi_{i-1} \rangle$ es una constante, la integral de interacción entre orbitales primeros vecinos, $\alpha(z_n)$ es la autoenergía de sitio correspondiente al n -ésimo átomo y además en nuestro caso es una función periódica de z_n . ¿Qué significa que $\alpha(z_n)$ sea una función periódica de z_n , cuando ya hemos dicho que nuestro sistema es por definición no periódico? Significa que la función $\alpha(z)$, siendo z una variable continua, es una función periódica, por ejemplo $\alpha(z)$ podría estar dada por:

$$\alpha(z) = \cos(2\pi q z) \quad (2.7)$$

¿En qué radica entonces la no periodicidad o inconmensuración en nuestro caso? En la relación que hay entre el período de este coseno, q , y el espaciado entre átomos. Si q es un número racional, por ejemplo, $q=1/3$, teniendo en cuenta que la posición de los átomos estará dada por $z_n=na$, siendo a nuestra unidad de medida de distancias, si graficamos las autoenergías de sitio en función de n , obtendremos lo que aparece en la figura II.1(a). Se desprende de la figura que el sistema se repite a sí mismo cada tres átomos, la celda unidad, que sí existe en este caso, contiene tres átomos. Si en cambio, q es un número irracional, por ejemplo $q=(\sqrt{13} - 3)/2 = .3027756375\dots$ si graficamos las autoenergías de sitio en función de n , obtendremos lo que aparece en la figura II.1(b). Se ve claramente que aún cuando α como función de z es una función periódica, la distribución de los átomos no se repite y por lo tanto no se puede definir una celda unidad. En esto precisamente radica la no periodicidad de nuestro sistema.

Los f_n que aparecen en la ecuación (2.6) son los coeficientes de expansión de la función de onda de uniones fuertes, tal como lo indica la ecuación (2.2).

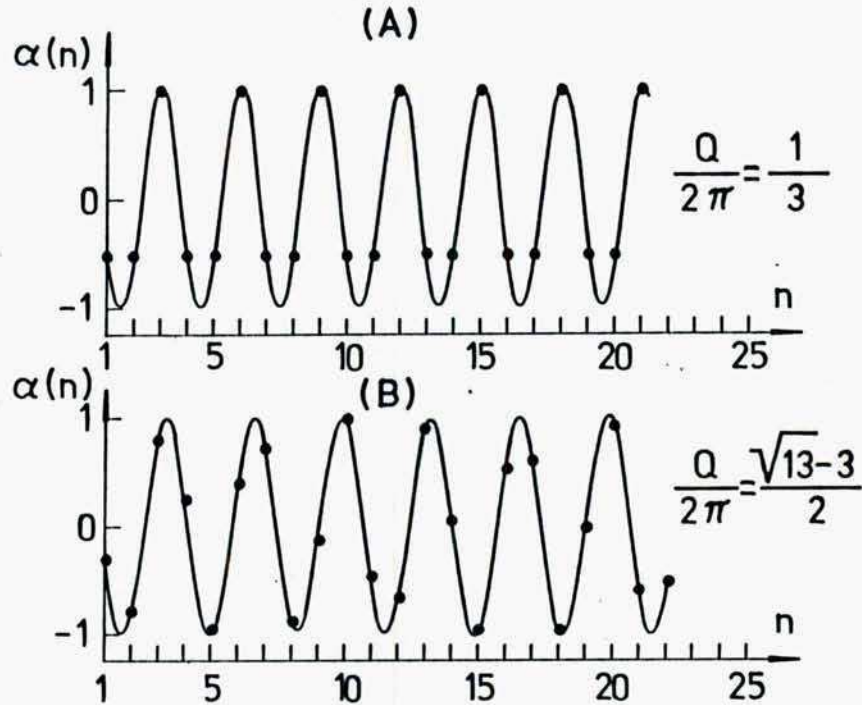


FIGURA II.1: $\alpha(z)=\cos(2\pi qz)$ en función de a .

a) $q=1/3$, b) $q=(\sqrt{13}-3)/2$. Los círculos llenos indican el valor de las autoenergías de sitio para átomos cuyas posiciones de equilibrio están dadas por $z=na$ con $a=1$.

Antes de seguir adelante, introduciremos un par de conceptos que se usarán a lo largo del trabajo, ellos son los del "sistema conmensurado más cercano" y el de "longitud característica". Todo número irracional q , puede ser escrito como una fracción continua de la siguiente forma⁽³⁵⁾:

$$q = a_0 + \frac{1}{a_1 + \frac{1}{a_2 + \frac{1}{a_3 + \frac{1}{\ddots}}}}$$

(2.8)

En esta expansión $a_0, a_1, a_3 \dots$ son números enteros. Si a_1 es un entero impar podemos reescribir q de la siguiente forma:

$$q = a_0 + \frac{1}{a_1} - \delta$$

(2.9)

y si a_1 es un entero par, entonces, podemos escribir:

$$q = a_0 + \frac{1}{a_1 + 1} + \delta$$

(2.10)

En (2.9) y (2.10) δ es menor que $1/a_1$ ó $1/a_1 + 1$ respectivamente. Resumiendo podemos decir que todo irracional puede ser escrito de la manera siguiente:

$$q = a_0 + \frac{1}{P} \pm \delta$$

(2.11)

P es un entero impar y δ un cierto porcentaje de $1/P$. Llamaremos "conmensurado más cercano" a un sistema inconmensurado con parámetro de modulación $q = a_0 + 1/P \pm \delta$ a aquél sistema conmensurado que tiene una celda unidad compuesta por P átomos.

Llamaremos "longitud característica λ_c " a la distancia existente entre $a_1 + 1$ átomos. Comenzando a mirar el sistema a partir del átomo i , podemos decir que a una distancia λ_c de i el motivo atómico comprendido entre i e $i + \lambda_c$ 'casi' se repite a sí mismo.

En el ejemplo de la figura II.1(b), el conmensurado más cercano es el que tiene tres átomos en la celda unidad y la longitud característica es $\lambda_c = 3a$ con $a=1$ en este caso.

A continuación describiremos los diferentes modelos usados para $\alpha(z_n)$ en este capítulo.

Modelo 1: La función $\alpha(z_n)$ es la extensamente usada función de modulación cosenoidal, cuyo período es inconmensurado con a , la constante de la red cristalina. Sea de aquí en más $a=1$, entonces:

$$\alpha(z_n) = \alpha_0 + \Delta\alpha \cos(2\pi q z_n + h) \quad (2.12)$$

En (2.12) q es un número irracional, h es la fase de la modulación y $z_n = n$. Esto último implica que en la cadena unidimensional los átomos están equidistantes a distancia unidad. El Hamiltoniano que se obtiene haciendo $\Delta\alpha=2$, es el que aparece en el estudio de un electrón en un cristal bidimensional al que se le aplica un campo magnético perpendicular como hemos indicado en el Capítulo I^(15,16).

Como ya dijimos $n(E)$ tiene en este caso gaps y minigaps. Se ha probado que la densidad de estados integrada, $N(E)$, tiene para este modelo características interesantes. Si E está en un gap $N(E) = m_0 + Qm_1$, m_0 y m_1 son enteros y $Q=2\pi q$. Los enteros son diferentes para gaps distintos, de tal manera que existe una forma de clasificar los gaps por medio de un conjunto de enteros⁽³⁶⁾. Se cree que para $\Delta\alpha \neq 0$ el espectro de este sistema es un conjunto de Cantor⁽²⁵⁾. Recordemos que un conjunto de Cantor es un conjunto cerrado, de medida nula y que

tiene la potencia del continuo (conjunto no numerable). En otras palabras, el espectro de H sería un espectro denso pero discreto, no habría realmente bandas. En el caso, $\Delta\alpha=2.$, m_1 es exactamente el entero que aparece en la conductancia del efecto Hall cuantizado, que en una meseta es exactamente igual a $(m_1 e^2)/h$ (37).

Este modelo ha sido estudiado por varios autores y para q irracional, el espectro de H es independiente de la fase h .

Modelo 2: En este segundo modelo proponemos una función periódica, no analítica, para la modulación $\alpha(z_n)$, una modulación tipo zigzag. Usamos en este caso la misma amplitud y período que en la ecuación (2.12) y también $z_n=n$ (la red unidimensional igualmente espaciada).

Dentro de la precisión de nuestros resultados para la densidad de estados, ésta no depende de la fase, por tal razón hemos elegido en todos los casos $h=0$.

Los elementos diagonales del Hamiltoniano, tienen en este modelo la siguiente forma:

$$\alpha(z_n) = \begin{cases} \Delta\alpha((2Q/\pi)n-1-4K) & 2K\pi/Q \leq n < (2K+1)\pi/Q \\ \Delta\alpha(-(2Q/\pi)+3+4K) & \pi/Q(2K+1) \leq n < (2K+2)\pi/Q \end{cases}$$

$K=0,1,2,\dots \quad (2.13)$

Las autoenergías de sitio están uniformemente distribuidas entre $+\Delta\alpha$ y $-\Delta\alpha$ en este modelo. Ver figura II.2.

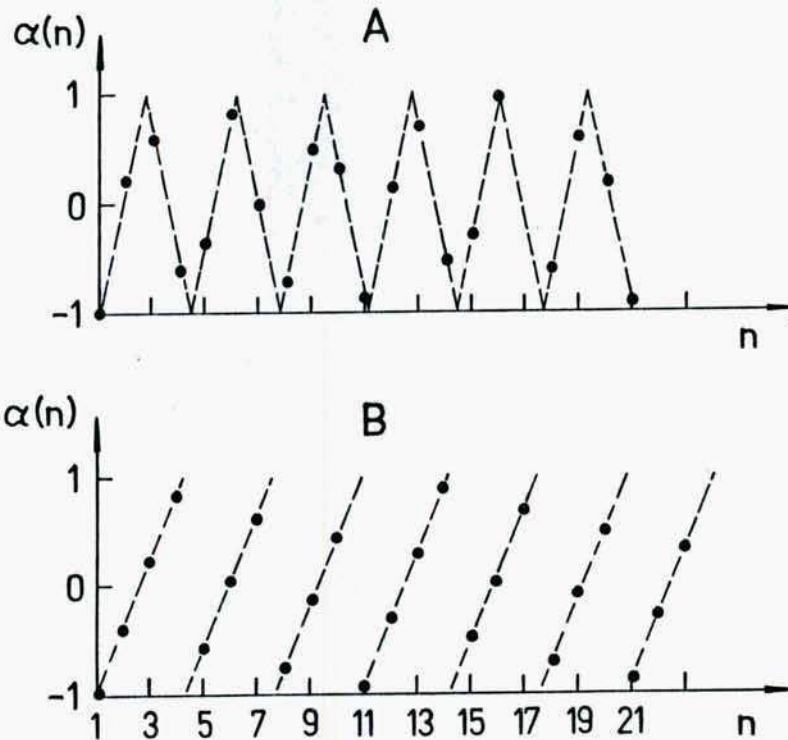


FIGURA II.2: Autoenergías de sitio $\alpha(n)$ en función de la posición de los átomos en la cadena para a) modelo zigzag y b) modelo diente de sierra. En ambos casos $Q/2\pi=(\sqrt{13}-3)/2$

Modelo 3: En este caso usamos

$$\alpha(z_n) = \Delta \operatorname{atg}(Qn) \quad n=0, 1, 2, \dots \quad (2.14)$$

Hemos introducido este modelo sólo por razones de completitud y a los fines de poder comparar con las otras modulaciones, dado que su densidad de estados ya ha sido obtenida analíticamente^(32,33).

Modelo 4: La modulación tipo diente de sierra es nuevamente una función no analítica:

$$\alpha(z_n) = \Delta \alpha \left(\left(\frac{Q}{\pi} \right) n - 1 - 2K \right) \quad (2K\pi/Q) \leq n \leq 2(K+1)\pi/Q$$

$$K = 0, 1, 2, \dots \quad (2.15)$$

La distribución de las autoenergías de sitio, $\alpha(z_n)$, es constante como en el modelo 2 y la función tiene una discontinuidad que se repite periódicamente. Ver figura II.2.

En todos los modelos estamos suponiendo que la inconmensuración proviene de un campo externo, que no modifica las posiciones atómicas, pero que sí modifica el entorno atómico, manifestándose esta modificación a través de la modulación de las energías de sitio. Un ejemplo, al cual se podría aplicar alguno de estos modelos es al caso de las cadenas de Hg en $\text{AsF}_6\text{Hg}_{3-\delta}$, cuya inconmensuración es de composición.

II.3 Cálculo de la densidad de estados para los distintos modelos

La densidad de estados, $n(E)$, fue calculada por medio de un método que cuenta los autovalores menores que una energía dada (Negative Eigenvalue Counting Method). A partir de aquí cuando nos refiramos a este método lo denominaremos "Método de Dean"⁽³⁸⁾. En el Apéndice II hacemos una descripción del mismo. Este método se presta para calcular densidades de estado de sistemas desordenados, pues, dado que en éstos no existe periodicidad del Hamiltoniano, no se puede usar el método de Bloch, que consiste en pasar al espacio recíproco por medio de una transformación de Fourier de las variables del Hamiltoniano, quedando finalmente matrices del tamaño de la celda unidad para diagonalizar.

La celda unidad de un sistema inconmensurado es de tamaño infinito. Algunos autores aproximan, en estos casos, el número Q que aparece en las ecuaciones por $2\pi(L/M)$, en donde L y M son enteros obtenidos de la expansión del número irracional en fracciones continuas. Dado que nosotros hemos usado el método de Dean, que al ser muy eficiente permite considerar cadenas de

átomos muy largas, no nos hemos visto en la obligación de reemplazar el sistema inconmensurado por uno conmensurado. De hecho, nosotros reemplazamos los números irracionales por el racional más cercano dentro de los límites de precisión de la computadora. En todos los cálculos hemos tomado cadenas abiertas de 10000 átomos cada una.

Hemos usado tres valores para Q , cuya expansión en fracciones continuas se obtiene haciendo en (2.8), $a_0=0.$, y $a_1 = a_2 = \dots = a_\infty = r$, con $r=2, 3$ y 36 . O sea explícitamente:

$$Q = 2\pi q = \frac{2\pi}{r + \frac{1}{r + \frac{1}{r + \dots}}} \quad (2.16)$$

Las razones para haber seleccionado estos valores para Q son en parte de índole histórica, a saberse: las primeras publicaciones que hemos leído sobre el particular han sido las de Sokoloff, quien hizo sus cálculos para $Q/(2\pi) = (\sqrt{13}-3)/2$, cuya expansión en fracciones continuas es la que corresponde a $r=3$ en (2.16). El ejemplo $r=2$ lo hemos elegido pues queríamos obtener la densidad de estados para un sistema, cuyo apartamiento del conmensurado más cercano fuese por exceso, ver ecuación (2.9). En este caso, el conmensurado más cercano es el dado por $P=3$ en (2.11) y su longitud característica es $\lambda_c = a_1$, con $a_1 = 2$. El caso $r=3$ puede considerarse como una perturbación a un sistema con celda unidad igual a tres y longitud característica, λ_c , igual a a_1 , con $a_1 = 3$. Y finalmente, el ejemplo correspondiente a $r=36$ fue el primer ejemplo que se nos ocurrió

calcular porque resulta interesante ver si aún para el caso de considerar un sistema inconmensurado, tal que su conmensurado más cercano tiene celda unidad grande, se pueden distinguir los efectos que produce la inconmensuración.

En las figuras II.3 y II.4 mostramos histogramas para la densidad de estados (para la mitad de la banda ya que $n(E)$ es simétrica en todos estos modelos) para $r=3$ y $\Delta\alpha = 1$. y 3 . respectivamente. Las densidades de estados son sorprendentemente dependientes de la función periódica usada para la modulación de las autoenergías de sitio. La función coseno da lugar a gaps grandes, mientras que la tangente no posee ninguno. La función zigzag produce una densidad de estados similar a la de la modulación tipo coseno, mientras que la modulación diente de sierra es bastante diferente de las otras dos y produce gaps más pequeños.

Si definimos $p=2\pi/Q$, este parámetro indica el número promedio de átomos por período de la modulación, que en el caso que estamos tratando es 3.3 . En los modelos zigzag y diente de sierra el gap más ancho está probablemente asociado con el gap que tiene el sistema conmensurado con tres átomos por celda unidad (tres es el entero impar más próximo a p).

Aún cuando en el modelo con modulación coseno para $\Delta\alpha = 2$. según Aubry⁽¹⁷⁾, todos los estados se localizan simultáneamente, es interesante notar que no se observa ningún cambio cualitativo en la densidad de estados al pasar de $\Delta\alpha < 2$. a $\Delta\alpha > 2$.

En la figura II.5 se muestran los histogramas obtenidos para $r=36$ y $\Delta\alpha = 1$. Uno esperaría ver 35 o más gaps en la densidad de estados, pero debido a que el paso del histograma no es lo suficientemente pequeño, no todos ellos son evidentes. Nuevamente en este ejemplo las densidades de estado correspondientes a las modulaciones coseno y zigzag son similares entre sí, mientras que la correspondiente a la modulación diente de sierra

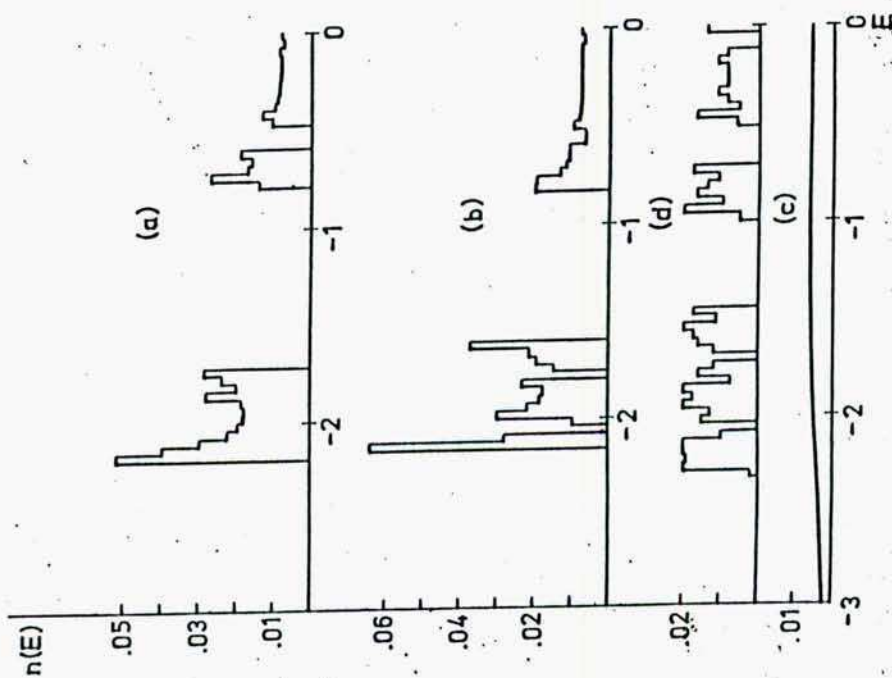


FIGURA II.3: Densidades de estado para los modelos
a) coseno, b) zigzag, c) diente de sierra
y d) tg, para la mitad de la banda. He-
mos tomado $\Delta\alpha = 1$, $t=1$, $\alpha_0=0$ y $r=3$ en
las ecuaciones (2.6), (2.12), (2.13),
(2.14), (2.15) y (2.16)

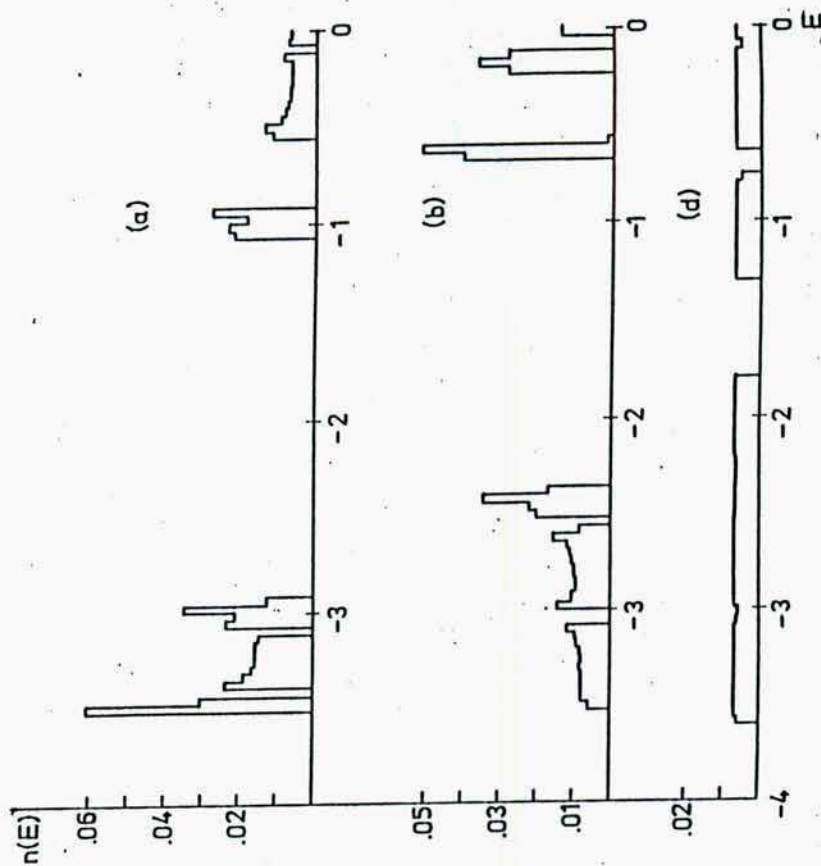


FIGURA II.4: Igual que en la figura II.3 pero con $\Delta\alpha = 3$.

tiene gaps más angostos. En las regiones en las cuales hay gaps, especialmente en el caso de las modulaciones zigzag y coseno, las bandas tienen todas el mismo ancho y altura. Esto significa que contienen el mismo número de niveles de energía en el mismo intervalo.

En todos los cálculos se ha tomado $t = 1$.

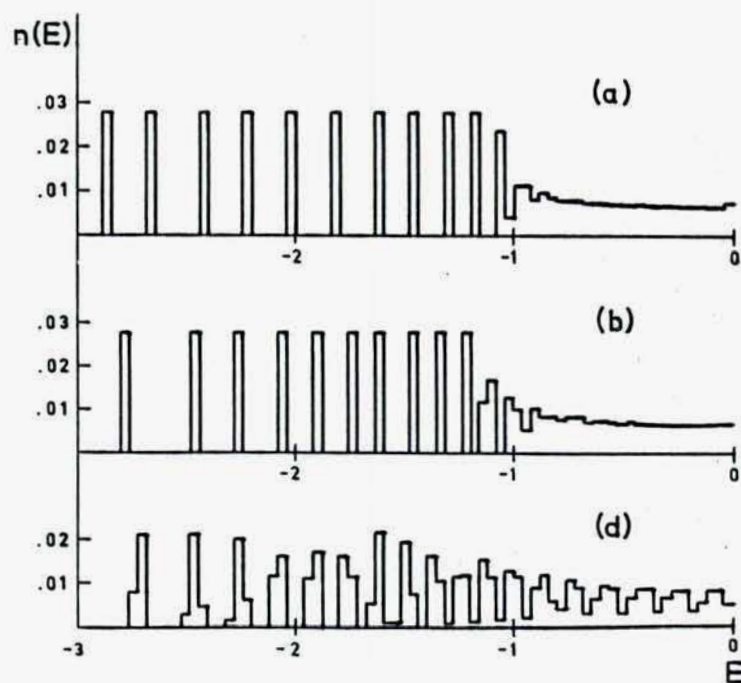


FIGURA II.5: Igual que en la fig. II.3 pero con $r=36$ en (2.16)

II.4 Distribución de los estados electrónicos en las bandas y minibandas

II.4.1 Proporción de los estados en las bandas principales

Para todas las modulaciones usadas se ha observado que la densidad de estados se subdivide en P bandas principales, cada

una de las cuales posee a su vez subbandas. Las bandas principales se caracterizan por contener el siguiente número de estados:

Caso 1: a_1 par

En este caso $Q/(2\pi) = q = 1/P + \delta$, δ es un porcentaje "x" de $1/P$, o sea:

$$|x| = \left| \frac{1/P - q}{1/P} \right| \quad (2.17)$$

Las $P-1$ bandas laterales contienen el siguiente número de estados:

$$A = (N^0 \text{ total de estados} + |x| * N^0 \text{ total de estados})/P \quad (2.18)$$

y la banda central contiene B estados, siendo:

$$B = A - |x| * N^0 \text{ total de estados} \quad (2.19)$$

Caso 2: a_1 impar

En este caso se tiene, $Q/(2\pi) = q = 1/P - \delta$. También en este caso hay un total de P bandas, las $P-1$ bandas laterales contienen el siguiente número de estados:

$$A = (N^0 \text{ total de estados} - |x| * N^0 \text{ total de estados})/P \quad (2.20)$$

y la banda central tiene B estados, siendo B:

$$B = A + N^0 \text{ total de estados} * |x| \quad (2.21)$$

O sea que "mirando" al inconmensurado desde el conmensurado más cercano se observa que la proporción de estados en defecto o

en exceso que tiene la banda central (la banda que se encuentra alrededor de $E = 0$.) con respecto a las bandas laterales, está estrechamente vinculado con el grado de apartamiento del inconmensurado con respecto al conmensurado más cercano.

Se desprende de todo lo dicho que, cualquiera sea el grado de inconmensuración, se trate de inconmensurados cuyo apartamiento del conmensurado más cercano sea por exceso o por defecto, siempre hay estados en $E = 0$. Los únicos casos para los cuales la densidad de estados no contiene una banda en $E = 0$, son aquellos en los cuales se está en presencia de un conmensurado de orden par.

En la tabla II.1 aparecen los porcentajes máximos del número total de estados que pueden presentar en exceso o en defecto, con respecto a las bandas laterales, los sistemas inconmensurados en su banda central. Esta tabla nos está indicando que en caso de tener una inconmensuración del tipo $1/3 + \delta$, nunca podremos tener en la banda central un número de estados que sea menor que el número de estados de las bandas laterales menos el 50% del total de estados; de la misma manera si $q = 1/3 - \delta$, la banda central nunca podrá tener un exceso de estados con respecto a las bandas laterales que sea mayor que el 25% del total de estados y así sucesivamente.

La estructura de bandas del inconmensurado es, entonces, un reflejo de la estructura de bandas del conmensurado más cercano. Si el nivel de Fermi cayese en $E = 0$, el sistema podría ser conductor, cualquiera fuese el grado de inconmensuración, dado que un inconmensurado siempre tiene estados en $E = 0$.

Conmensurado más cercano $q=1/P$	1/3	1/5	1/7	1/9
Porcentajes de apartamiento	+50% -25%	+25% -16.6%	+16.6% -12.5%	+12.5%

TABLA II.1: Porcentajes máximos del número total de estados, que pueden presentar en exceso o en defecto, con respecto a las bandas laterales, los sistemas inconmensurados en su banda central en función del conmensurado más cercano, cuya periodicidad viene dada por $q=1/P$

De la tabla II.1 se desprende que cuanto más grande sea la celda unidad del conmensurado más cercano, menos se va a diferenciar la estructura de bandas del inconmensurado con respecto a la de aquél. En lo que sí se distinguirán, será en la aparición de las minibandas, tal como veremos en la sección siguiente.

II.4.2 Proporción de los estados en las minibandas

Para determinar la proporción de estados en las minibandas se ha analizado la densidad de estados para los tres tipos de Hamiltoniano que presentan estructura de minigaps, para el valor q correspondiente a $r=3$. En el caso de la modulación tipo coseno hemos calculado también para $r=2, 4$ y 6 . Hemos usado en todos los casos cadenas de 1000 átomos y varios valores de $\Delta\alpha$. En las tablas II.2 y II.3 aparecen los resultados obtenidos.

Las tablas deben interpretarse de la siguiente manera, tómese, por ejemplo, la tabla II.3, modelo zigzag. Se ha calculado para $r=3$, como dice al comienzo de la tabla. El sistema tiene tres bandas, para cada valor de $\Delta\alpha$ figura cómo se subdivide cada banda principal; así para $\Delta\alpha=1.$, la banda 1 se subdivide (de acuerdo con la precisión de nuestros cálculos) en tres minibandas, las cuales contienen de izquierda a derecha 92, 119 y 92 estados cada uno, respectivamente. La segunda banda principal (banda central), se subdivide también en tres minibandas, que contienen 92, 210 y 92 estados respectivamente, y la tercera banda principal se subdivide de la misma forma que la primera.

Se ha tomado, en todos los casos, el mismo paso de energías al calcular la densidad de estados, $\Delta E = .02t$ y $t=1.$ en todos los ejemplos. En las figuras II.3, II.4 y II.5 el paso de energías tomado es igual a $\Delta E = .04t$.

Para la modulación coseno, el valor de $\Delta\alpha$ para el cual la estructura de gaps y minigaps es más evidente es $\Delta\alpha=2.$, lo cual está de acuerdo con lo obtenido por otros autores. A partir de este valor de $\Delta\alpha$, hacia arriba o hacia abajo, el ancho de los minigaps disminuye.

En el caso del Hamiltoniano tipo zigzag (Tabla II.3), las bandas laterales presentan mayor estructura para $\Delta\alpha=2.$ y a la banda central le ocurre lo propio para $\Delta\alpha=3.$

En el Hamiltoniano diente de sierra el valor de $\Delta\alpha$ para el cual los minigaps tienen ancho máximo es 1.

Como hemos usado cadenas relativamente cortas aparecen, debido a los efectos de borde, algunos estados aislados que hemos sumado a la minibanda más cercana en energía.

Aún cuando nosotros no tenemos suficientes resultados como para inferir una sistemática como la hallada por Janssen en el

caso vibracional⁽¹³⁾, podemos afirmar que la división y subdivisión de las bandas en todos los casos acompaña a la expansión del número irracional en fracciones continuas (ver ecuación (2.8)) de la manera como se describe a continuación. Siempre tendremos P bandas principales, recuerdo del conmensurado más cercano. Si $P = a_1 + 1$, o sea si a_1 es un entero par, entonces las subdivisiones obedecen la siguiente ley (ver tablas II.2 y II.3):

$$\begin{array}{ll}
 1 = a_1 A_0 + A_1 & \text{primera subdivisión} \\
 A_0 = a_2 A_1 + A_2 & \text{segunda subdivisión} \\
 . & \\
 . & \\
 . & \\
 A_{i-1} = a_{i+1} A_i + A_{i+1} & i+1\text{-ésima subdivisión}
 \end{array}
 \tag{2.22}$$

en (2.22), $A_0 = (1+x)/(a_1)$, x es el porcentaje de apartamiento del número irracional con respecto al racional más cercano del tipo $1/P$, con P entero impar. La secuencia (2.22) indica que la primera subdivisión (bandas principales), consta de a_1 bandas laterales con A_0 estados y la banda central con A_1 estados, de tal manera que en total suman 1. A su vez, las bandas laterales se subdividirán en a_2 bandas con A_1 estados y una banda con A_2 estados, de tal manera que todas sumen A_0 estados y así sucesivamente.

En el caso en el cual $P = a_1$, o sea a_1 es un entero impar, la ley de subdivisión en bandas es la siguiente:

$$\begin{array}{ll}
 1 = (a_1 - 1)A_0 + (A_0 + A_1) & \\
 A_0 = a_2 A_1 + A_2 & \\
 A_1 = a_3 A_2 + A_3 & \\
 . & . \\
 . & . \\
 . & .
 \end{array}
 \tag{2.23}$$

$r=2$

$\Delta\alpha$ Banda	.5	1.	2.	3.
1	414	172 70 172	100 72 70 29 71 71	92 120 91
2	172	171	71 30 70	92 210 92
3	414	172 70 171	71 29 42 29 71 72 100	92 120 91

$r=4$

$\Delta\alpha$ Banda	.5	1.	2.
1	236	236	180 56
2	236	56 180	56 56 68 56
3	56	56	56
4	236	180 56	56 68 56 56
5	236	236	56 180

$r=6$

$\Delta\alpha$ Banda	.5	1.	2.
1.	162	162	162
2	162	162	162
3		162	26 27 57 26 26
4	352	27	27
5		162	26 26 56 27 27
6	161	162	162
7	162	163	162

TABLA II.2: Modelo con modulación coseno. Número de estados en las minibandas en función del grado de inconmensuración y de $\Delta\alpha$.

Modelo zigzag

$\Delta\alpha$ Banda	.5	1.	2.	3.
1	91 211	92 119 92	92 91 98 92	92 119 92
2	396	92 210 92	91 91 28 91 92	92 27 64 28 64 27 92
3	211 91	92 119 92	92 28 92 91	92 120 91

Modelo diente de sierra

$\Delta\alpha$ Banda	.5	1.	2.	3.
1	91 92 27 92	91 93 27 64 28	92 211	303
2	63 28 28 64 27 64 28 28 64	64 27 27 37 27 28 64 28 28 64	92 91 28 92 92	92 210 92
3	91 27 92 91	91 27 91 92	211 92	303

TABLA II.3: Número de estados en las minibandas en función de $\Delta\alpha$ para los modelos zigzag y diente de sierra. En ambos casos $r=3$ (ec. (2.16))

En (2.23), $A_0 = (1-x)/a_1$ y $A_1 = x$. Nuevamente la subdivisión en bandas sigue la secuencia, tal como se explicó para el caso anterior.

II.5 Ejemplo del $\text{Hg}_{3-\delta}\text{AsF}_6$ Cálculo aproximado del potencial en la cadena unidimensional de Hg

El compuesto $\text{Hg}_{3-\delta}\text{AsF}_6$ pertenece a una clase de conductores anisotrópicos, que consisten en cadenas metálicas de iones de mercurio que tienen como soporte una matriz iónica⁽³⁹⁾. En la figura II.6 aparece la estructura cristalina del compuesto. Los iones octahédricos de AsF_6^- forman una red tetragonal ($a=b=7.54\text{\AA}$, $c=12.34\text{\AA}$), dentro de la cual hay canales que no se intersectan y que corren paralelos a los ejes a y b , como se ve en la figura. No hay cadenas de Hg paralelas al eje c . La distancia entre Hg y Hg dentro de las cadenas, que es $d=2.64\text{\AA}$, es inconmensurada con la constante de red de la matriz tetragonal y a temperatura ambiente las posiciones de los átomos de Hg dentro de una dada cadena están desordenadas con respecto a las posiciones de los átomos de Hg en cadenas vecinas. A $T_c = 120\text{ K}$ hay una transición de fase y las cadenas de Hg se ordenan formando una red tridimensional regular. Se han llevado a cabo mediciones precisas con difracción de neutrones que indican que la estequiometría del compuesto es $\text{Hg}_{3-\delta}\text{AsF}_6$, δ depende de la temperatura, variando de .18 a temperatura ambiente a .21 a bajas temperaturas⁽⁴⁰⁾. Como consecuencia de su estructura, las propiedades electrónicas de este sistema son muy anisotrópicas. Este sistema presenta una inconmensuración de composición. El hecho de que la distancia Hg-Hg sea inconmensurada con la constante de red de la red subyacente de AsF_6^- , tiene como efecto que la interacción entre las cadenas de mercurio y la matriz de AsF_6^- sea despreciable^(41,43). La interacción entre cadenas de Hg, por encima de T_c , es muy pequeña y por lo tanto se puede considerar al sistema de cadenas de mercurio como realmente unidimensional⁽⁴⁴⁾.

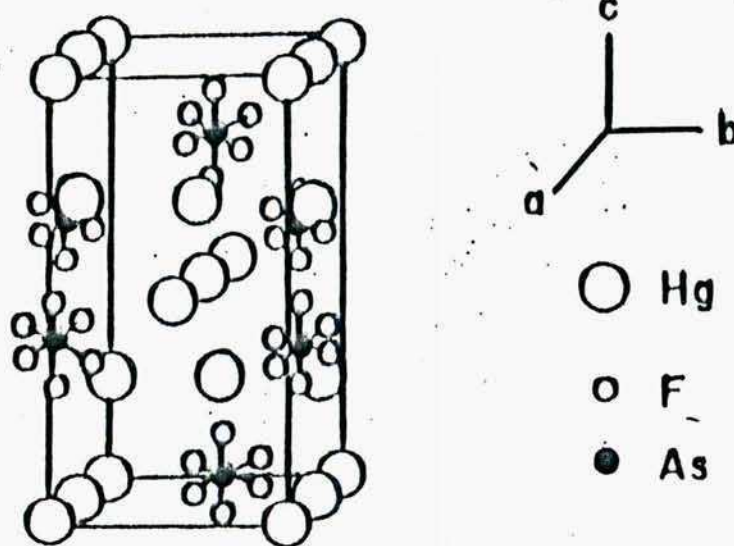


FIGURA II.6: Vista de la estructura cristalina del compuesto $\text{Hg}_{3-\delta}\text{AsF}_6$
 Figura sacada de la referencia 40.

Hemos calculado el potencial sobre los átomos de Hg, para ver si lo que se obtiene puede ser comparado con alguno de los potenciales propuestos en la sección II.2.

En los cálculos del potencial electrostático, $V_{Hg}(r)/q_{Hg} = \sum_j q_j/r_{ij}$, hemos descartado la influencia de los iones de Fluor por poseer éstos capa cerrada de electrones. Para calcular este potencial se ha escrito un programa que genera las cadenas de Hg y la matriz de As. De este programa existen dos versiones, en una de ellas las cadenas de Hg están desordenadas unas con respecto a las otras ("unlocked") y la otra versión genera el sistema por debajo de T_c , o sea una red tridimensional ordenada ("locked").

Para calcular $V_{Hg}(r)$ se tomaron tantas capas de Hg y de As como se hizo necesario en cada caso, para obtener neutralidad en el entorno de los mercurios considerados (con una precisión de $\pm 0.01e$). Se tomó al grupo AsF_6 con una carga puntual igual a -1. Dado que hay ≈ 2.86 átomos de Hg por cada grupo AsF_6 , se tomó a cada Hg como una carga puntual de 0.35^+ .

El potencial obtenido sobre cada átomo de una cadena de Hg para el caso en el cual las cadenas están corridas unas con respecto a las otras en forma aleatoria, aparece graficado en la figura II.7 y el obtenido para las cadenas ordenadas aparecen en la figura II.8.

Hemos calculado el promedio del potencial para los dos casos (locked y unlocked) obteniendo:

$$\begin{aligned} V_{Hg} &= \sum V_{Hg}(i)/N = -.0644eV && \text{cadenas de Hg al azar} \\ V_{Hg} &= \sum V_{Hg}(i)/N = -.0641eV && \text{cadenas de Hg ordenadas} \end{aligned}$$

en estas expresiones N es el número de mercurios considerado en el promedio (23 átomos). De la comparación de los datos obtenidos para V_{Hg} en ambos casos, se desprende que los mercurios

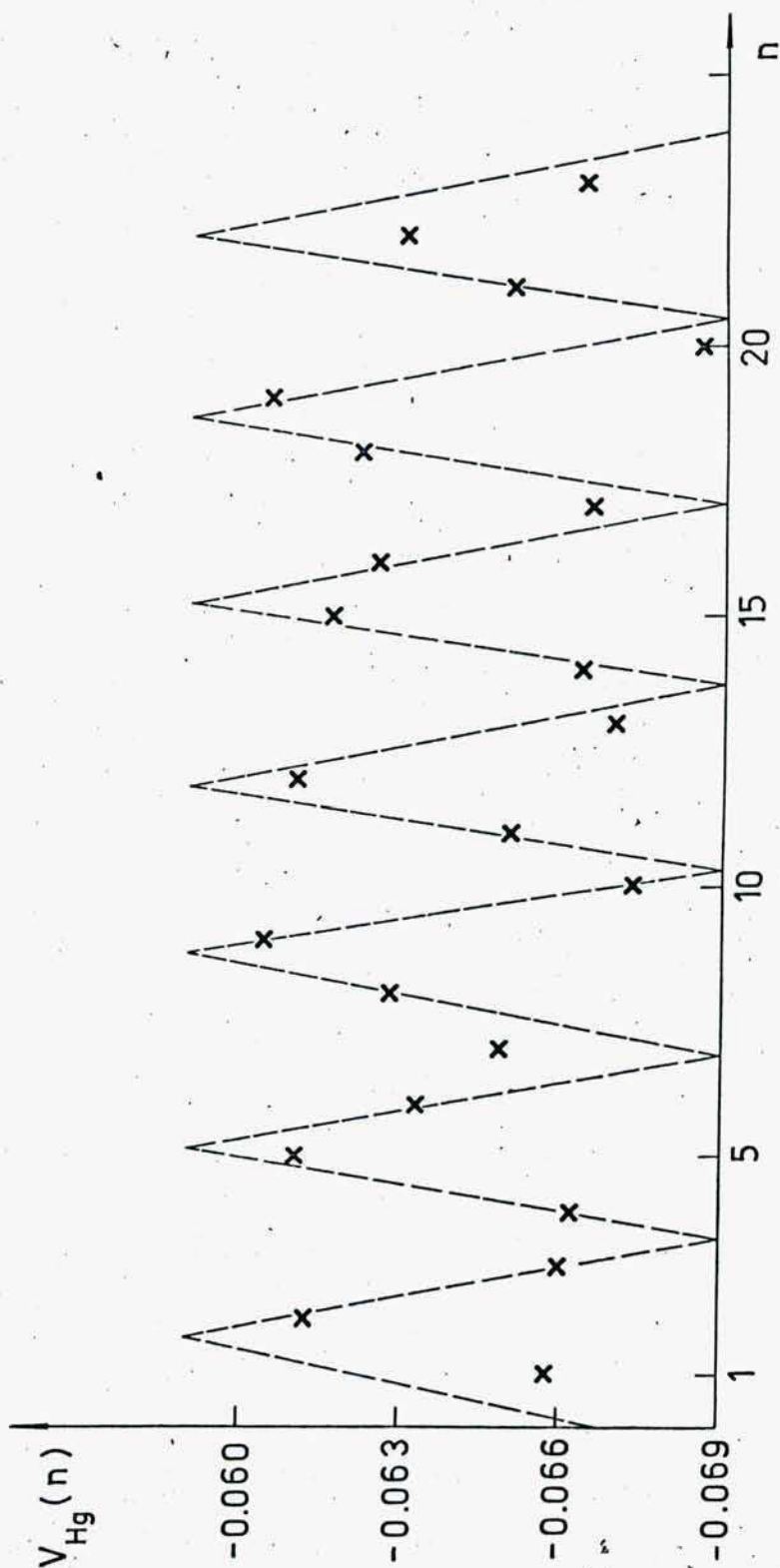


FIGURA VII.7: Potencial, V_{Hg} , sobre cada átomo de una cadena de Hg en el compuesto $\text{Hg}_{3-6}\text{AsF}_6$, para el caso en el cual las cadenas están corridas unas con respecto a las otras en forma aleatoria. Los valores obtenidos están indicados con las cruces y por ellos hemos pasado una función zigzag adecuada.

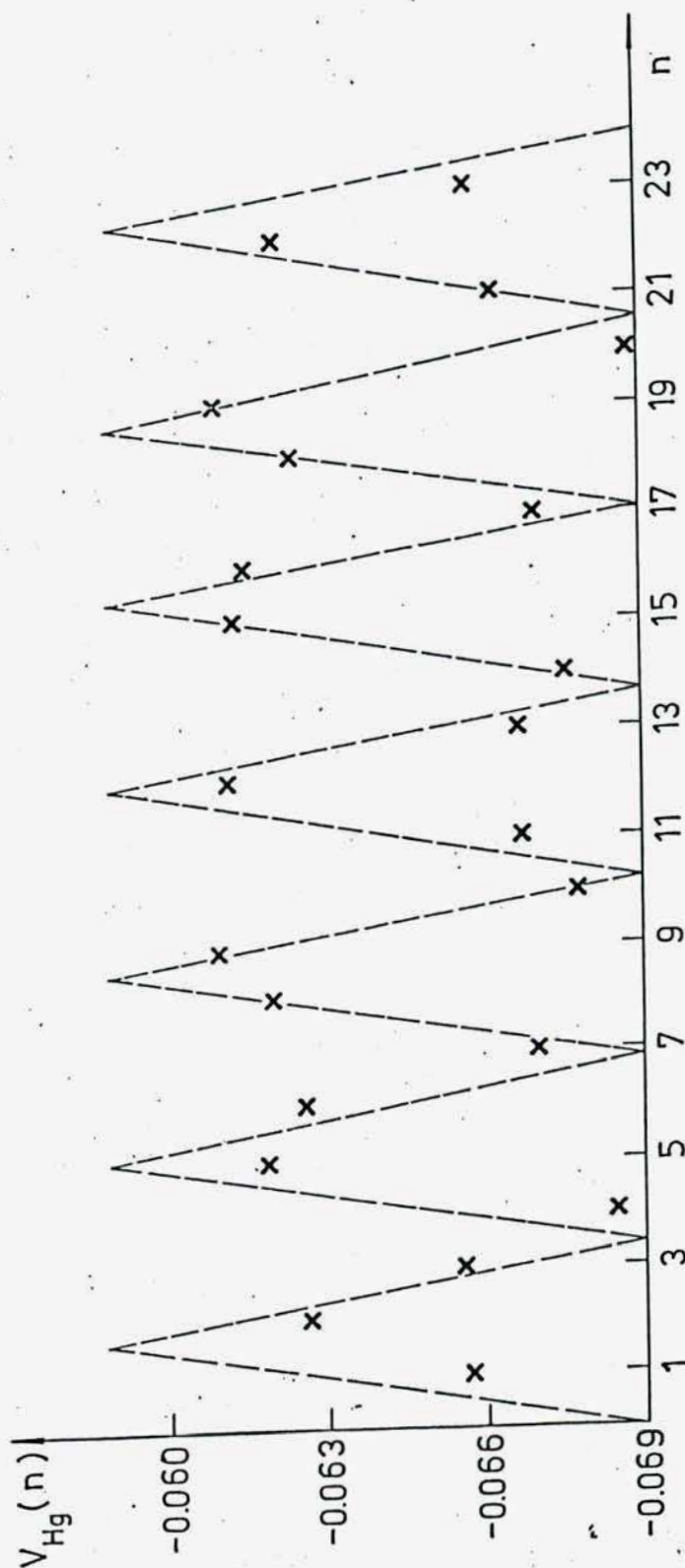


FIGURA II.8: Igual que en la figura II.7 pero para las cadenas de Hg ordenadas.

"ven" sobre todo a los arsénicos y los primeros vecinos Hg, o sea que la aleatoriedad en la posición relativa de los átomos en las distintas cadenas no produce ningún cambio significativo en el comportamiento del potencial.

De las fig. II.7 y II.8 se desprende que se puede ajustar tanto una función tipo zigzag como una tipo coseno por los valores del potencial V_{Hg} obtenidos. En los gráficos hemos hecho pasar una función tipo zigzag.

El período que esperábamos obtener para V_{Hg} era de 7.54\AA , que es la distancia entre los átomos de As, pero de las figuras se obtiene un período $T=d*n$, siendo n el número promedio de átomos por cada vuelta del zigzag, igual a $T=d*n=2.64*3.28\text{\AA}=8.66\text{\AA}$. Creemos que la razón por la cual no hemos obtenido el período correcto en el cálculo del potencial, se debe a que el potencial de la forma $1/r$ converge muy lentamente y que hubiera sido necesario tomar muchas más capas de átomos alrededor de cada mercurio para poder obtener mejores resultados. Con el objeto de corroborar lo dicho, hemos probado calculando con un potencial de la forma $1/r^4$, que converge muchísimo más rápido y tal como lo esperábamos, se obtuvo el período correcto.

Surge de los cálculos hechos que tanto el potencial con modulación tipo coseno como la función zigzag pueden tener sentido físico y cuál de los potenciales se encuentra más cerca de la realidad en cada caso particular, se desprenderá de las propiedades electrónicas propias de cada ejemplo.

En este trabajo se han usado valores grandes para $\Delta\alpha$, con el objeto de hacer más notorios los efectos de la inconmensuración, mucho mayores que los que resultan de los cálculos de esta sección.

II.6 Conclusiones

Hemos mostrado hasta aquí que la estructura de la densidad de estados electrónica de los sistemas inconmensurados depende fuertemente del tipo de modulación usada para los elementos diagonales del Hamiltoniano.

Un resultado interesante que hemos obtenido es que la distribución de estados en gaps y minigaps depende en todos los casos de la expansión del número irracional q (cociente entre dos periodicidades que compiten dentro del sistema) en fracciones continuas. Además, el número de estados en exceso o en defecto en la banda central de la densidad de estados, con respecto al número de estados en las bandas laterales es el mismo para todos los tipos de modulación en los cuales existen gaps.

Una diferencia de importancia entre los distintos modelos estudiados, consiste en que el valor de la amplitud de la modulación para el cual la estructura de gaps y minigaps se hace más evidente es distinto en cada caso. En el ejemplo con la modulación tipo coseno, ese valor es $\Delta\alpha = 2$. para toda la banda. En el caso de la modulación tipo zigzag ese valor depende de la minibanda que estemos considerando y del valor de q y el modelo diente de sierra depende del valor de q .

Calculando aproximadamente el potencial sobre los átomos de las cadenas de Hg del compuesto $\text{Hg}_{3-\delta}\text{AsF}_6$ hemos mostrado que la modulación tipo zigzag introducida por nosotros parece tan adecuada como la modulación tipo coseno para el ejemplo considerado.

CAPITULO III

Introducción de desorden en los sistemas inconmensurados unidimensionales

III.1 Introducción

Los sistemas inconmensurados tienen en común con los sistemas desordenados el no poseer una celda unidad, cuya repetición dé como resultado el cristal, en otras palabras, los dos tipos de sistemas carecen de periodicidad. A diferencia de lo que ocurre en los sistemas desordenados, en los inconmensurados existe orden de largo alcance. Cabe, entonces, preguntarse cómo son las diferencias que existen entre los sistemas desordenados y los distintos modelos inconmensurados entre sí.

Hemos elegido, en este trabajo, comparar con el modelo de Anderson de sistema desordenado. Se trata de un modelo de uniones fuertes, en el cual el desorden se manifiesta en los elementos diagonales del Hamiltoniano. Este desorden se obtiene eligiendo al azar los elementos diagonales del Hamiltoniano de una distribución uniforme de probabilidades, $P(\alpha)^{(45)}$. O sea:

$$\begin{aligned} P(\alpha) &= 1./(2\Delta\alpha) & -\Delta\alpha < \alpha < \Delta\alpha \\ P(\alpha) &= 0. & \text{fuera de este intervalo} \end{aligned} \quad (3.1)$$

de tal manera que $2\Delta\alpha$ es el ancho de la distribución. Esta distribución de los elementos diagonales del Hamiltoniano es la misma que en nuestros dos modelos inconmensurados, a pesar de que en un caso habrá correlación entre átomos vecinos y en el otro no. Hay diferencias obvias en $n(E)$, ya que en un caso hay gaps, mientras que en el otro no.

Nos hemos planteado dos modelos distintos para introducir desorden en los sistemas inconmensurados: en el primer caso, todos los elementos diagonales del sistema inconmensurado son modificados al azar siguiendo la misma ley, mientras que en el segundo modelo unos pocos elementos de matriz, seleccionados al azar, son modificados dejando el resto intacto. En ambos casos la distribución es tal que conduce al desorden de Anderson, cuando el grado de desorden se aproxima a su valor máximo⁽³⁵⁾.

Recientemente, H. Aoki ha publicado un trabajo en el que estudia la estructura electrónica de sistemas que poseen una distorsión modulada de la red y les ha introducido desorden, también del tipo del de Anderson⁽⁴⁶⁾. Aún cuando en el problema de Aoki la modulación se manifiesta a través de los elementos no diagonales del Hamiltoniano de uniones fuertes, encuentra, también en este caso, que la estructura electrónica del sistema es muy distinta a la del sistema desordenado sin distorsión y que la misma es sensible a la magnitud y período de la modulación.

III.2 Modelos de desorden

Los dos tipos de desorden que hemos introducido podrían utilizarse para simular el proceso de fusión. En ambos el desorden se manifiesta a través de los elementos diagonales del Hamiltoniano (autoenergías de sitio).

Se trata de estudiar en este Capítulo cómo convergen al límite totalmente desordenado los modelos inconmensurados al introducir los dos tipos de desorden.

a) **Desorden uniforme**

En este tipo de desorden, las autoenergías de sitio $\alpha^d(z_n)$ del sistema están dadas por la siguiente expresión:

$$\alpha^d(z_n) = (1-x)\alpha(z_n) + xR_n \quad (3.2)$$

donde R_n es un número al azar que se encuentra en el intervalo $[-\Delta\alpha, +\Delta\alpha]$, x es el grado de desorden y los $\alpha(z_n)$ están dados por los modelos inconmensurados introducidos en el capítulo anterior.

En el límite $x \rightarrow 0$, el sistema tiende al inconmensurado original, mientras que en el límite $x \rightarrow 1$ se obtiene el modelo de Anderson.

b) Desorden tipo dislocación

Este modelo de desorden podría simular un proceso de fusión provocado por la presencia de dislocaciones. En este caso se selecciona al azar una fracción x de átomos del sistema inconmensurado y se le asigna a cada uno de estos átomos autoenergías de sitio obtenidas al azar dentro del intervalo $[-\Delta\alpha, +\Delta\alpha]$. Sea para estos átomos $\alpha^d(z_n) = R_n$. El resto de las autoenergías queda inalterado, o sea, conserva los valores que tenía dentro del modelo inconmensurado usado.

También en este caso, en el límite $x \rightarrow 0$ el sistema tiende al inconmensurado original, mientras que en el límite $x \rightarrow 1$ se obtiene un sistema totalmente desordenado de Anderson.

Es útil introducir una medida de la desviación de cada sistema inconmensurado, parcialmente desordenado, con respecto al modelo de Anderson totalmente desordenado. A tal efecto, hemos introducido el parámetro $\Theta(x)$, definido por la siguiente expresión:

$$\Theta(x) = \left[\frac{\int [n(E, x) - n(E, 1)]^2 dE}{\int [n(E, 0) - n(E, 1)]^2 dE} \right]^{1/2} \quad (3.3)$$

En la expresión anterior, $n(E, x)$ es la densidad de estados del sistema inconmensurado, parcialmente desordenado, con grado de desorden x .

Las distribuciones de las autoenergías de los modelos zigzag y diente de sierra son uniformes y por eso elegimos para el desorden, también una distribución uniforme. Eso nos permite introducir un parámetro, $\theta(x)$, que mide los apartamientos de los sistemas parcialmente desordenados con respecto al modelo de Anderson completamente desordenado y tener la misma ley de distribución para las autoenergías de sitio en ambos límites ($x=0$. y $x=1$.)

III.3. Cálculo de las densidades de estados

Se ha calculado la densidad de estados de los sistemas con desorden haciendo uso del mismo método aplicado en los cálculos del Capítulo II y tomando cadenas de 10000 átomos en cada caso. En la figura III.1 aparece la densidad de estados, $n(E)$, para $r=3$ (ecuación (2.16)) y $\Delta\alpha = 1$. como función del grado de desorden, x , para el desorden de tipo uniforme introducido en el modelo zigzag. De la figura se desprende que se produce un llenado paulatino de los gaps, provocado por un ensanchamiento de las bandas de energía. Para $x \approx 0.5$ todos los gaps han desaparecido. Para $x \approx 0.7$ la densidad de estados es similar a la del modelo completamente desordenado (fig.III.1, $x=1$.). A medida que el grado de desorden crece los minigaps del sistema inconmensurado son los primeros en llenarse y los gaps más anchos (resabio de los gaps del sistema conmensurado más cercano) terminan de llenarse para valores mayores de x . Aún cuando en los dos casos, tanto para el modelo inconmensurado como para el sistema de Anderson, cualquier valor de α que se encuentre entre $-\Delta\alpha$ y $+\Delta\alpha$ es igualmente probable, en el sistema inconmensurado $\alpha(z_n)$ está unívocamente relacionado con $\alpha(z_{n+1})$, mientras que en el sistema desordenado son totalmente independientes. Esto produce densidades de estado muy distintas, la correspondiente a los sistemas inconmensurados ya fue discutida en el Capítulo II y la del sistema completamente desordenado tiene el ancho de banda

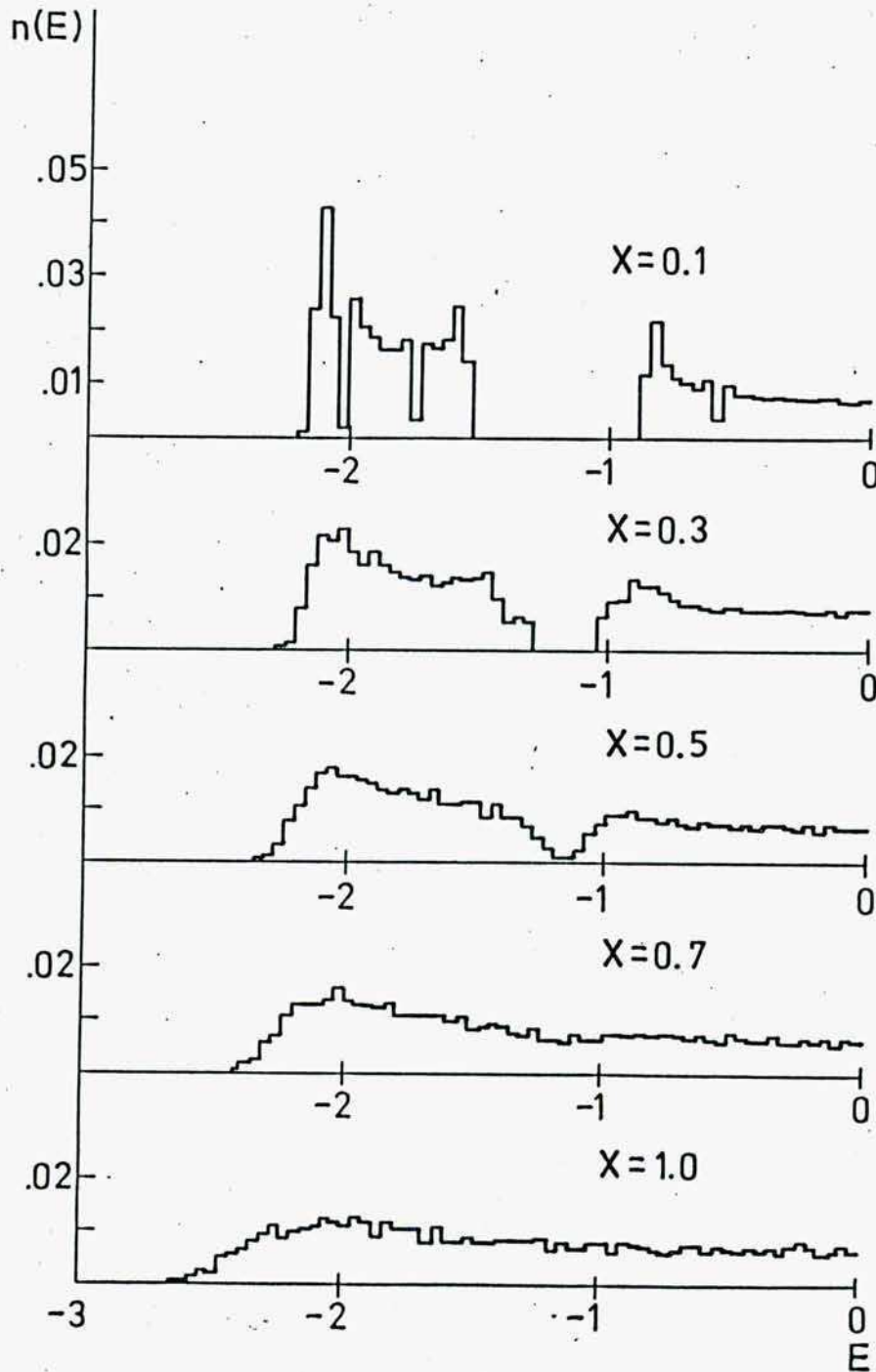


FIGURA III.1: Densidad de estados, $n(E)$, para $r=3$ en ec. (2.16), $\Delta\alpha=1$, y $t=1$ como función del grado de desorden, x , para el desorden tipo uniforme introducido en el modelo zigzag.

más grande que el sistema ordenado con un átomo por celda unidad (fig. III.1, $x=1$) y no tiene la singularidad en el borde de banda, característica del caso unidimensional.

El desorden tipo dislocación presenta características muy diferentes de las del desorden uniforme, dado que en el caso del desorden tipo dislocación, para cualquier valor de x desaparecen todos los gaps simultáneamente. Esto se debe al hecho de que a una fracción " x " del número total de átomos se le asignan autoenergías de sitio al azar que no están correlacionadas con las de sus vecinos. Notemos que en el caso del desorden uniforme, para un dado orbital, cuya autoenergía de sitio era α antes de introducir el desorden, después de introducir un grado " x " de desorden uniforme, la misma podrá encontrarse en el intervalo $[(1-x)\alpha \pm x\Delta\alpha]$, mientras que si lo que introducimos es desorden tipo dislocación la autoenergía de sitio podrá no modificarse en absoluto o encontrarse en el intervalo $[-\Delta\alpha, +\Delta\alpha]$, de tal manera que en el desorden de tipo uniforme las autoenergías cubren un intervalo de valores más restringido.

En la figura III.2 se muestra el efecto del desorden tipo dislocación sobre el modelo zigzag, también para una inconmensuración tal que $r=3$ en la ecuación (2.16).

En la tabla III.1 aparece el parámetro $\Theta(x)$ para los dos tipos de desorden aplicados al modelo zigzag. En nuestros cálculos las integrales han sido reemplazadas por sumas con un intervalo de energías igual a $.02t$ ($t=1.$). Nótese que $\Theta(1)$ no es en ningún caso igual a cero; no puede serlo por la siguiente razón: a dos poblaciones de átomos distintas y finitas corresponderán densidades de estado distintas; como en el numerador de (3.3) la suma que aparece es sobre la diferencia al cuadrado entre dos densidades de estado calculadas sobre distintas poblaciones, esa suma será siempre mayor que cero. El valor límite $\Theta(1)$ depende del denominador de la ecuación (3.2) y varía por tal razón con r y $\Delta\alpha$. $\Theta(1)$ se aproximará tanto más a cero,

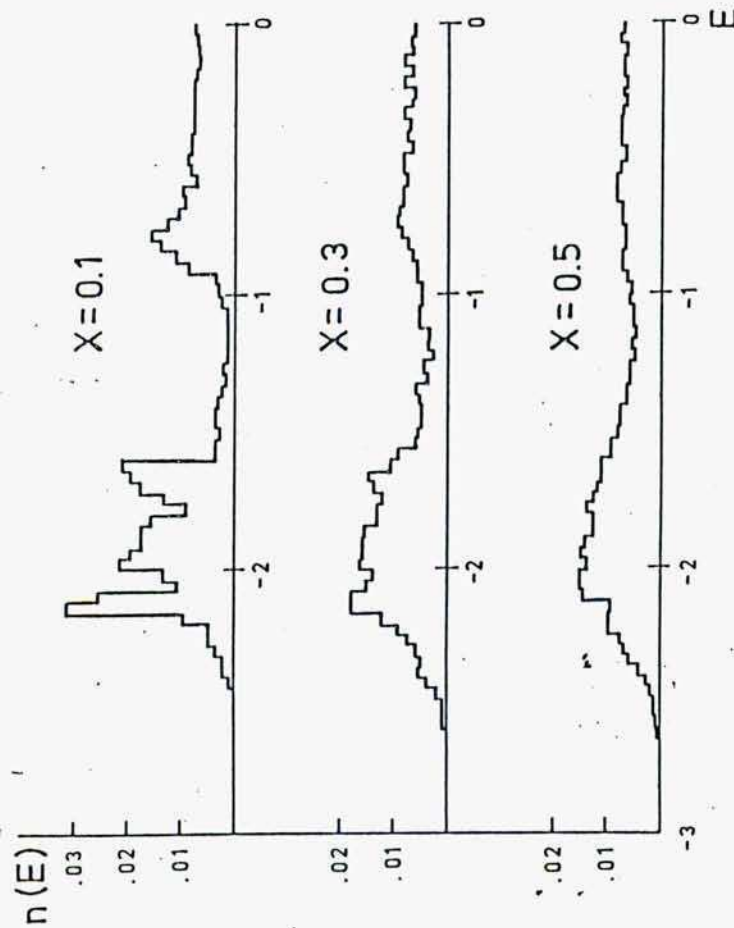


FIGURA III.2: Desorden tipo dislocación introducido en el modelo zigzag. $r=3$ y $\Delta\alpha=t=1$.

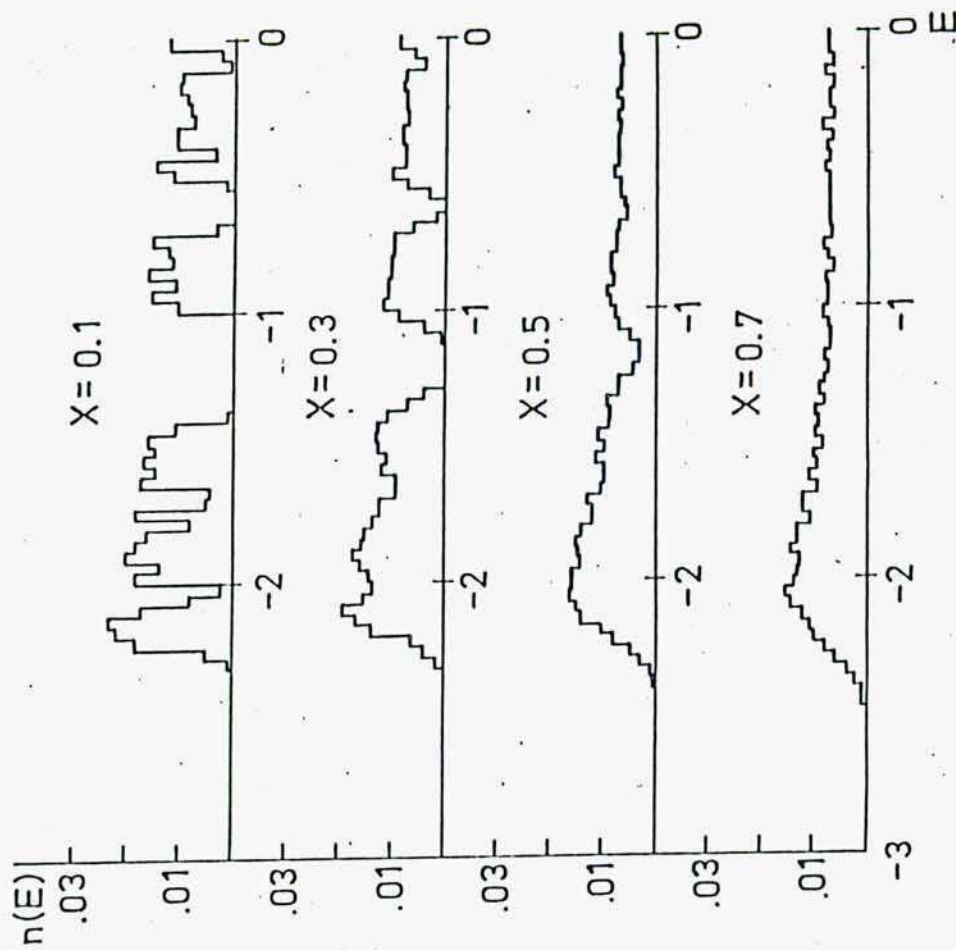


FIGURA III.3: Efecto del desorden uniforme sobre la densidad de estados del modelo diente de sierra. $r=3$, $\Delta\alpha=t=1$.

cuanto mayor sea el valor del denominador de (3.3) y éste crecerá con respecto al numerador (para cada valor de r y $\Delta\alpha$) al aumentar el número de intervalos de energía involucrados en la suma.

Lo primero que se desprende de la tabla III.1, es que el desorden tipo dislocación es más fuerte que el desorden uniforme, pues $\theta(x)$ para este tipo de desorden llega a su valor final, $\theta(1)$, para valores menores de x que para el desorden uniforme. También se desprende de la tabla que cuando $r=36$, para un mismo tipo de desorden, $\theta(x)$ converge más rápido que para $r=3$. O sea que para ambos tipos de desorden $\theta(x)$ converge más rápidamente cuanto más grande es la celda unidad del conmensurado más cercano y además para un dado x , $\theta(x)$ decrece a medida que crece el valor de r en la ecuación (2.16).

x	Desorden uniforme		Desorden tipo dislocación	
	r=3	r=36	r=3	r=36
0.0	1.00	1.00	1.00	1.00
0.1	0.73	0.52	0.53	0.30
0.2	0.54	0.29	0.35	0.17
0.3	0.45	0.17	0.26	0.12
0.4	0.38	0.14	0.20	0.11
0.5	0.30	0.13	0.17	0.10
0.6	0.23	0.12	0.15	0.10
0.7	0.18	0.12	0.14	0.10
0.8	0.16	0.10	0.14	0.09
0.9	0.14	0.10	0.14	0.09
1.0	0.13	0.10	0.13	0.09

TABLA III.1: $\theta(x)$ en función de x para el modelo zigzag. $\Delta\alpha=1$. Los números de esta tabla tienen un error de ± 0.01

El resultado más interesante es que $\theta(x)$ es una función no lineal de x y que los valores límite se obtienen ya para sistemas parcialmente desordenados. Para el desorden tipo dislocación este valor límite de $\theta(x)$ se obtiene para $x \approx .5$, si $r=36$ y para $x \approx .7$ si $r=3$.

La figura III.3 muestra el efecto del desorden uniforme en el modelo diente de sierra y en la tabla III.2 aparece el parámetro $\theta(x)$ para ambos tipos de desorden impuestos a este modelo. El comportamiento de $\theta(x)$ como función de r y del tipo de desorden es similar al comportamiento obtenido para el modelo zigzag.

x	Desorden uniforme		Desorden tipo dislocación	
	r=3	r=36	r=3	r=36
0.0	1.00	1.00	1.00	1.00
0.1	0.87	0.79	0.54	0.42
0.2	0.67	0.47	0.38	0.31
0.3	0.55	0.32	0.32	0.26
0.4	0.47	0.28	0.27	0.25
0.5	0.39	0.24	0.23	0.25
0.6	0.32	0.25	0.20	0.23
0.7	0.28	0.24	0.20	0.22
0.8	0.24	0.23	0.20	0.24
0.9	0.21	0.21	0.20	0.20
1.0	0.22	0.22	0.20	0.22

TABLA III.2: $\theta(x)$ en función de x para el modelo diente de sierra, $\Delta\alpha = 1$.

Se puede obtener un resultado interesante comparando ambas tablas para $x=1$. Debido a que el valor de $\theta(1)$ es prácticamente el mismo en ambos casos, se desprende que el denominador

$$D = \int [n(E,0) - n(E,1)]^2 dE \quad (3.4)$$

es en promedio cuatro veces más grande para el modelo zigzag.

Esto da una medida cuantitativa de las diferencias entre los dos modelos de sistemas inconmensurados e indica que el modelo diente de sierra se encuentra más cerca del modelo de Anderson completamente desordenado que el modelo zigzag, para $\Delta\alpha=1$. Esta diferencia entre ambos modelos fue estudiada en función de $\Delta\alpha$, por ejemplo, para $r=3$ el cociente $D_{\text{diente de sierra}}/D_{\text{zigzag}}$ es aproximadamente igual a 1 para $\Delta\alpha=.5$ y aproximadamente igual a 5.5 para $\Delta\alpha=1.5$. Ver tabla III.3. Los valores que aparecen en la tabla no hay que tomarlos en términos absolutos, sino en términos relativos, dado que no son el promedio sobre un muestreo. Hay que tomar la tabla como indicativa de que el modelo diente de sierra se encuentra más cerca del modelo de Anderson que el modelo zigzag, con excepción hecha del caso $r=3$ y $\Delta\alpha=.5$ para el cual los dos modelos están igualmente cerca del de Anderson. La tendencia se acentúa a medida que crecen r y $\Delta\alpha$. Esto se desprende también de la comparación de las tablas III.1 y III.2.

$\Delta\alpha$	$D_{\text{diente de sierra}}/D_{\text{zigzag}}$	
	$r=3$	$r=36$
0.5	1.	2.4
1.	2.5	4.8
1.5	5.5	5.8

TABLA III.3: $D_{\text{diente de sierra}}/D_{\text{zigzag}}$ en función de $\Delta\alpha$ y r

La tabla III.3 se obtuvo sacando el promedio entre los valores correspondientes al desorden tipo dislocación y al desorden uniforme.

III.4 Conclusiones

Hemos estudiado en este capítulo cómo afecta el desorden a la densidad de estados de sistemas inconmensurados unidimensionales.

Hemos mostrado que con la introducción de desorden los modelos inconmensurados se tornan prácticamente indistinguibles del modelo de Anderson para un grado de desorden, x , bastante menor que 1.

Comparando el efecto producido por los dos tipos de desorden introducidos por nosotros, mostramos que el desorden tipo dislocación es más fuerte que el uniforme, lo cual se pone de manifiesto en el hecho de que el límite de Anderson se obtiene en el primer caso, para valores más chicos del grado de desorden x .

En cuanto a los modelos inconmensurados estudiados, concluimos que la cercanía al modelo de Anderson depende del modelo considerado, encontrándose el modelo diente de sierra más cerca del modelo de Anderson que el zigzag, incrementándose esta tendencia a medida que crecen r y $\Delta\alpha$.

CAPITULO IV

Modelo unidimensional con solitones: su densidad de estados

IV.1 Introducción

Los modelos del Capítulo II consisten en cadenas formadas por átomos equidistantes entre sí. El efecto del potencial externo inconmensurado con la red, se manifiesta a través de una modulación de los elementos diagonales del Hamiltoniano electrónico. En realidad el potencial periódico de la red puede llegar a ocasionar complicadas distorsiones no lineales en la estructura modulada que da origen al potencial externo y cuya periodicidad es inconmensurada con la de la red. Según hemos visto en el Capítulo I, esa estructura modulada puede ser una onda de densidad de carga, una distorsión modulada de la red, en el caso de inconmensuración de desplazamiento; o bien otra red de átomos u "onda de densidad de masa", en el caso de inconmensuración de composición. Si el acoplamiento entre las dos periodicidades varía, el potencial de la red puede dar lugar a una transición llamada "transición conmensurado-inconmensurado", en la cual los dos períodos se conmensuran. Cerca de esta transición, el sistema inconmensurado consiste de regiones que son conmensuradas con la red separadas por paredes de dominio o disconmensuraciones. Estas paredes de dominio aparecen como solución de la ecuación de Sine-Gordon y por tal razón se denominan "solitones" (7,8).

Para los compuestos de composición no estequiométrica, que están formados por cadenas de aceptores y cadenas de donores, como en el caso de $\text{Hg}_{3-\delta}\text{AsF}_6$ en el cual los períodos de la red de donores y de la red de aceptores son inconmensurados entre sí, se puede plantear el siguiente modelo. Se considera una red bidimensional compuesta por dos tipos de cadenas A y B, con

cada cadena de tipo A rodeada por cadenas de tipo B y viceversa⁽⁸⁾. Ver figura IV.1. En primera aproximación se puede considerar que cada cadena experimenta el efecto de un potencial periódico externo debido a las cadenas vecinas. Esto precisamente es lo que hemos hecho en el Capítulo II. Frank y van der Merwe mostraron que postulando para las cadenas, por ejemplo de tipo A, interacciones armónicas entre los átomos y reemplazando el efecto de las cadenas de tipo B sobre las cadenas de tipo A por un potencial externo sinusoidal, al variar la intensidad del potencial externo versus la intensidad de la interacción elástica dentro de la cadena, tiene lugar en este modelo una transición de fase conmensurado-inconmensurado y muy cerca del "lock-in" conmensurado el sistema consiste en una sucesión de solitones. En la figura IV.2 aparecen los átomos de la cadena considerada ubicados en el campo del potencial externo, en (a) la periodicidad de los átomos de la cadena es inconmensurada con la del potencial externo, en (b) el sistema se encuentra cerca del "lock-in" conmensurado, y presenta zonas conmensuradas con el potencial externo separadas por disconmensuraciones y en (c) ya se ha producido la transición, los átomos de la cadena en cuestión se encuentran en los pozos del potencial externo o sea que se han conmensurado con este último.

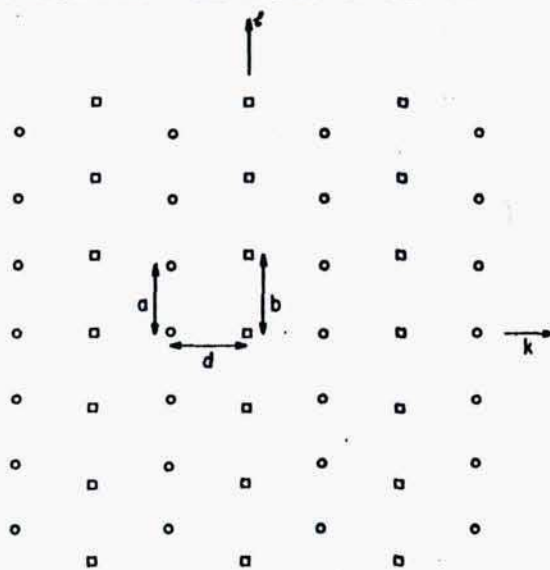


FIGURA IV.1: Sistema bidimensional formado por dos subredes interpenetrantes. (sacado de ref.8)

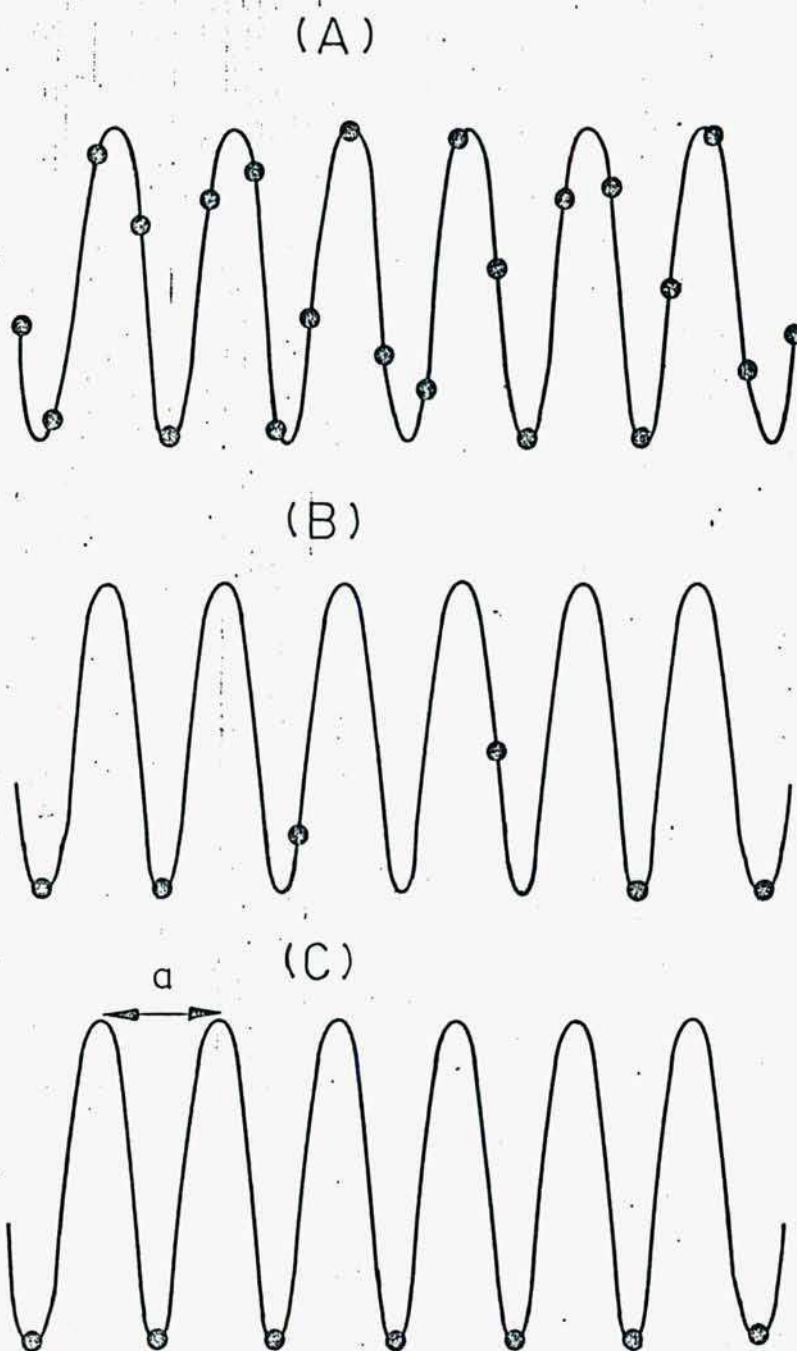


FIGURA IV.2: Átomos de la cadena unidimensional ubicados en el campo del potencial externo.

A) La periodicidad de la red de átomos negros es inconmensurada con la periodicidad del potencial externo.

B) Se describe una situación en la cual hay zonas de la cadena de átomos negros que se encuentran en los pozos del potencial externo, separadas por zonas inconmensuradas. En la fig. aparece tan sólo uno de los solitones.

C) Los átomos negros se encuentran en los pozos del potencial externo. Las dos periodicidades son conmensuradas.

En este capítulo nos interesa calcular la densidad de estados electrónica de sistemas, que como el descrito, presentan solitones, con el objeto de investigar la presencia o no de una estructura de gaps y minigaps al estilo de la que poseen los sistemas estudiados en el Capítulo II.

IV.2 Cálculo de las posiciones de equilibrio de los átomos

Siguiendo a Theodorou y Rice⁽⁸⁾, consideremos un cristal que está compuesto por dos subredes inconmensuradas entre sí, A y B, cuyas periodicidades son a y b respectivamente. Se supone que las dos subredes tienen cargas de signo opuesto y que se encuentran ligadas debido a la fuerza electrostática. Como las cadenas poseen periodicidades distintas, diferentes sitios de una misma cadena experimentarán potenciales distintos. Cada subred se encontrará bajo la influencia de un potencial periódico externo creado por la otra subred. Cada subred tendrá a su vez un período propio a lo largo del eje de la cadena, definido como el período de la cadena en ausencia del potencial externo. Supongamos que a y b son inconmensurados entre sí y $a \neq b$. Si $V_a(n)$ es la energía potencial en el sitio n de la red A, provocada por la subred B y de forma equivalente $V_b(n)$ es la energía potencial en el sitio n de la subred B producida por la subred A, $V_a(n)$ es periódica con período b y $V_b(n)$ con período a. Theodorou y Rice muestran que:

$$V_a(n) \approx (1/2)U_a \cos[(2\pi/b)(an-s)] \quad (4.1)$$

en donde s es el corrimiento de las cadenas B con respecto a las A y

$$U_a = [(8Q_a Q_b)/b] N_b K_0 (2\pi d/b) \quad (4.2)$$

N_b es el número de cadenas de tipo B primeras vecinas a distancia d de la cadena A, Q_a y Q_b son las cargas de los iones que corresponden respectivamente a las subredes A y B y K_0 es la función de Bessel de orden cero.

Si en lugar de calcular el efecto de B sobre A, calculamos el efecto de las cadenas A sobre las cadenas B, se obtiene:

$$U_b = [(8Q_a Q_b)/a] N_a K_0(2\pi d/a) \quad (4.3)$$

Para $a \ll b$ se obtiene que $|U_a| \gg |U_b|$, esto significa que el potencial externo más intenso será el percibido por la subred A. Por esta razón se puede considerar que la subred B es rígida con período igual a su período propio b y estudiaremos el efecto sobre la subred A debido a la presencia del potencial que se origina en las cadenas B.

Consideremos, entonces, que tenemos una sola cadena de átomos A, expuesta a un potencial externo. La energía potencial total de la cadena se podrá escribir como:

$$N\epsilon_a = 1/2 \mu_a \sum_n (z_{n+1} - z_n - a)^2 + U_a/2 \sum_n [1 - \cos(2\pi z_n/b)] \quad (4.4)$$

en donde z_n denota la posición del n -ésimo átomo y sea $U_a > 0$.

El primer término de (4.4) describe el hecho de que en ausencia del potencial de período b , la configuración de equilibrio de la cadena a temperatura cero está dada por una distancia entre átomos igual a " a ". Esta distancia minimiza la energía elástica. Por otro lado, en ausencia del primer término tendremos un mínimo de energía potencial para aquellas configuraciones

tales que $z_n = nb$. Cuando ambos términos están presentes el mínimo de energía se obtiene resolviendo el sistema de ecuaciones $d\varepsilon_a/dz_n = 0$, de donde

$$\Delta^2 \phi_n = z_{n+1} - 2z_n + z_{n-1} = \left(\frac{\pi U_a}{\mu_a b} \right) \sin((2\pi/b)z_n) \quad (4.5)$$

Esta ecuación nos da la posición de equilibrio del n -ésimo átomo de la cadena.

Haciendo la transformación

$$z_n = nb + (b/\pi)\phi_n + 1/2 b \quad (4.6)$$

que permite definir a la variable ϕ_n como una fase, (4.5) se transforma en

$$\phi_{n+1} - 2\phi_n + \phi_{n-1} = - \left(\frac{\pi^2 U_a}{\mu_a b^2} \right) \sin(2\phi_n) \quad (4.7)$$

La resolución de este sistema de ecuaciones es muy difícil si no se hace la siguiente aproximación:

$$\begin{aligned} \phi_{n-1} &= \phi_n - \frac{d\phi_n}{dn} + 1/2 \frac{d^2\phi_n}{dn^2} + \dots \\ \phi_{n+1} &= \phi_n + \frac{d\phi_n}{dn} + 1/2 \frac{d^2\phi_n}{dn^2} + \dots \end{aligned} \quad (4.8)$$

Esta aproximación, que es la aproximación del continuo, es válida siempre que $\Delta\phi_n = \phi_{n+1} - \phi_n$ sea pequeño. Truncando en las expresiones (4.8) a segundo orden, queda en (4.7):

$$\Delta^2\phi_n \approx d^2\phi_n/dn^2 \quad (4.9)$$

Esta aproximación implica una variación pequeña entre los desplazamientos de un sitio y el siguiente y es válida cuando

$$\frac{\pi^2 U_a}{\mu b^2} \ll \sin(2\phi_n) \quad (4.10)$$

Dentro de la aproximación del continuo llegamos, entonces, a la ecuación

$$\frac{d^2\phi_n}{dn^2} = - \frac{\pi^2 U_a}{\mu_a b^2} \sin(2\phi_n) \quad (4.11)$$

Esta es la bien conocida ecuación de Sine-Gordon que es no lineal y es la ecuación correspondiente al péndulo clásico. Para establecer la analogía basta con sustituir espacio por tiempo en (4.9).

En los ejemplos de conductores iónicos, los valores típicos son, $U_a \approx 10^{-2} \text{ eV}$, $\mu_a \approx 10^4 \text{ dyn/cm}$ y $b \approx 3\text{\AA}^{(8)}$, entonces $(\pi^2 U_a / \mu_a b^2) \approx 1.8 \cdot 10^{-2}$. Es justificado usar en estos casos la aproximación del continuo.

Físicamente se sabe que existen dos tipos de soluciones para la ecuación (4.11). La primera es la solución para oscilaciones pequeñas y la segunda surge cuando el péndulo tiene energía cinética suficiente como para dar un giro completo, entonces, si no hay disipación como en nuestro caso, aumentará indefinidamente su fase. Hay un valor de la relación entre la ener-

gía cinética y la potencial para el cual el péndulo puede dar el primer giro, existiendo entonces en este sistema una condición crítica para dos tipos diferentes de soluciones. Lo mismo va a suceder con nuestro sistema, sólo que la competencia entre energía cinética y potencial se refiere en nuestro caso a la competencia entre energía elástica y la energía potencial de interacción con la otra cadena.

Físicamente ocurre lo siguiente: partiendo de la situación conmensurada, en la cual la constante de energía elástica entre átomos es muy pequeña comparada con la intensidad del potencial externo, o sea $\mu_a b^2 \ll U_a$, la energía elástica de cada átomo estará dada por $(1/8)\pi^2 \mu_a (a-b)^2$, ubicándose los átomos en los pozos del potencial externo. Cuando $(1/2)\pi^2 \mu_a (a-b)^2 \sim U_a$, la energía elástica es del orden de la barrera de potencial que hay que superar para pasar de un pozo a otro del potencial externo. Existe, entonces, una condición crítica en función de U_a . En el caso crítico la solución del sistema es tal, que se necesita un tiempo infinito para dar una vuelta completa, si nos referimos a la analogía con el péndulo físico. Para $U_a = U_a^C$, aparece, en nuestro caso, el primer solitón, que también se suele llamar defecto, dislocación o disconmensuración. Esto es producto de la no linealidad del problema.

Para $U_a < U_a^C$ la solución presenta defectos periódicamente. Ver figura IV.2. Las funciones elípticas que son solución de la ecuación de Sine-Gordon tienen precisamente este comportamiento.

Se tienen, entonces, las siguientes posiciones de equilibrio para el problema:

$$z_n = \begin{cases} nb & U_a > U_a^C \\ nb + (b/n)\phi(n) + (1/2)b & U_a < U_a^C \end{cases} \quad (4.12)$$

$\phi(n)$ se obtiene resolviendo (4.11), con lo cual,

$$z_n = b \left(1 - \frac{1}{R_a} \right) n - (2b/\pi) \left\{ \sum_{m=1}^{\infty} \frac{1}{m} \frac{q_a^m}{1+q_a^{2m}} \right\} * \sin(2\pi(m/R_a)n) + \frac{b}{2} \quad (4.13)$$

q_a mide la amplitud de las desviaciones con respecto a una cadena de átomos equidistantes, tal que la distancia entre átomos primeros vecinos es:

$$d = b \left(1 - \frac{1}{R_a} \right) \quad (4.14)$$

R_a es el número promedio de átomos entre dislocaciones⁽⁸⁾.

IV.3 Cálculo de la densidad de estados

Habiendo hallado las posiciones de equilibrio de los átomos de la cadena de tipo A dentro de este modelo, podemos ahora calcular la densidad de estados electrónicos del sistema, suponiendo que la influencia del potencial externo se manifiesta a través de una modulación de los elementos diagonales del Hamiltoniano; esta modulación estará dada por $q = 2\pi/b$. De los modelos usados en el capítulo II, hemos usado sólo la función coseno

$$\alpha(z_n) = \Delta \cos(qz_n) \quad (4.15)$$

Hemos usado la función coseno para las autoenergías de sitio para ser consistentes con la forma funcional del potencial externo que aparece en (4.4). Este tipo de modulación también ha sido usado recientemente por Sokoloff para calcular la estructura de bandas de un sistema con solitones⁽²⁷⁾.

Antes de proceder a detallar los cálculos de densidad de estados realizados, creemos interesante llamar la atención sobre el comportamiento de $\alpha(z_n)$ en los casos extremos $U_a \approx U_a^C$ y $U_a \ll U_a^C$. Para $U_a \approx U_a^C$, el sistema tiene una densidad chica de solitones y la función q_a , que aparece en (4.13), está muy cerca de la unidad, pudiéndosela aproximar según el desarrollo que aparece en la ref. 8 y que aquí no hemos transcritto totalmente, por:

$$q_a \approx \text{Exp} \left(- \frac{\pi^2}{\ln(1/2 f \ln(f))} \right) \quad (4.16)$$

en (4.16) $f = 16 U_a^C / (U_a^C - U_a)$ y para $U_a/U_a^C \ll 1$ se tiene:

$$q_a \approx \frac{\pi^2 U_a}{64 U_a^C} \quad (4.17)$$

Para $U_a \approx U_a^C$, $\alpha(z_n)$ se comporta de la misma forma que z_n , o sea como una función de solitones, con regiones con valores constantes separadas por regiones con grandes variaciones. Como se desprende de (4.17), para $U_a/U_a^C \ll 1$, q_a tiende a cero y $\alpha(z_n)$ como función de n es de forma cosenoidal, o sea que nuestro modelo en este límite tiende al modelo con modulación coseno del Capítulo II. En la figura IV.3 mostramos $u_n = 2\pi(z_n/b - n)$ y $\alpha(z_n)$ en función de n para dos ejemplos particulares. Hemos supuesto $U_a \sim 10^{-2} \text{ eV}$, $\mu_a = 10^4 \text{ dyn/cm}$ y $b \sim 3 \text{ \AA}$, que son valores típicos para este tipo de sistemas⁽⁸⁾. Hemos tomado U_a como unidad de energías y b como unidad de distancias, entonces de acuerdo con esto $\mu_a = 55$. En nuestros ejemplos el que varía es el valor de "a". En el primer caso de la figura IV.3 $a = .914$, con estos valores para los parámetros a , μ_a , b y U_a se obtiene, empleando las fórmulas que aparecen en la referencia (8), que $R_a = 11.1$,

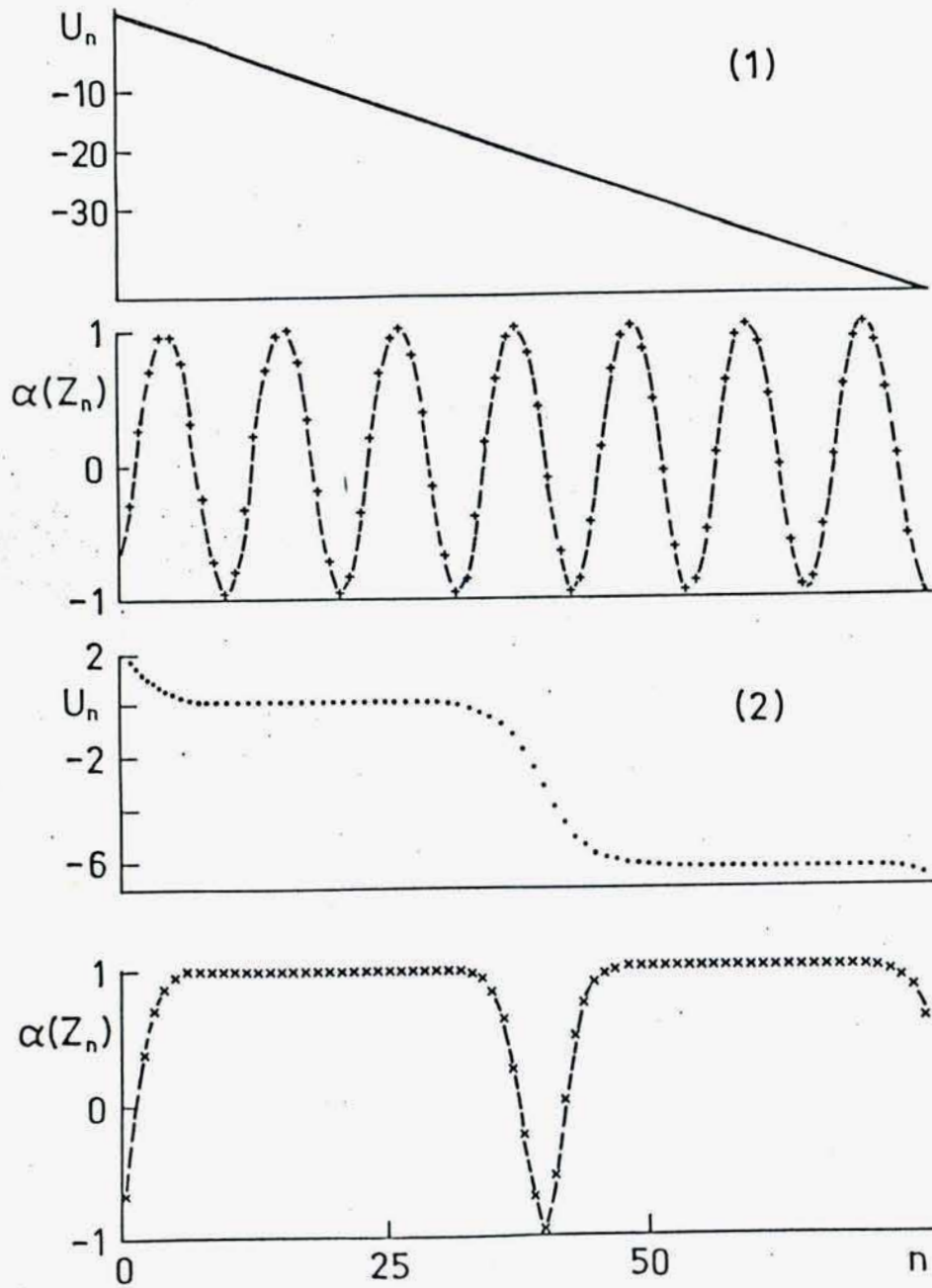


FIGURA IV.3: $u_n = 2\pi(z_n/b - n)$ y $\alpha(z_n) = \cos(2\pi z_n/b)$ para el modelo con solitones para los dos casos expuestos en el texto
 (1) $R_a = 11.1$, $q_a = 0.03$ y (2) $R_a = 40.8$, $q_a = 0.3$

$q_a = .03$ y $U_a = .2U_a^C$. q_a para este ejemplo lo hemos calculado usando (4.17). En el segundo ejemplo de la figura $a = .96$, con lo cual $R_a = 40.8$, $q_a = .3$ y $U_a = .985U_a^C$. En este caso, q_a lo hemos calculado usando (4.16). En el primer ejemplo u_n es prácticamente lineal con n , lo cual indica que los átomos están prácticamente equidistantes (a una distancia promedio de $\sim .9$) asemejándose, entonces, el sistema al modelo con modulación tipo coseno del Capítulo II. En el segundo ejemplo tanto u_n como $\alpha(z_n)$ tienen la forma típica de una función con solitones, nos encontramos cerca del límite conmensurado.

Las densidades de estado las hemos calculado usando el método de Dean⁽³⁸⁾, tomando para los ejemplos de la figura IV.3, $t = \Delta\alpha = 1$. en las ecuaciones (2.6) y (4.15). Ver figura IV.4. El primer ejemplo de esta figura muestra un número pequeño de gaps en comparación con el segundo ejemplo, debido al valor chico de R_a en este caso y la densidad de estados es prácticamente simétrica debido a que el valor de q_a , que mide la amplitud de las desviaciones con respecto a una cadena de átomos equidistantes, también es pequeño.

El segundo ejemplo de la figura IV.4 presenta un mayor número de gaps, debido al valor grande de R_a , pero los mismos están distribuidos de forma muy asimétrica (q_a es mayor que en el caso anterior) con los gaps más anchos en la zona de bajas energías.

La asimetría en la densidad de estados es una característica del comportamiento de los sistemas con solitones (q_a y U_a/U_a^C grandes) y esta asimetría se debe a que la distribución de los $\alpha(z_n)$ también es asimétrica. De hecho una gran proporción de los valores de $\alpha(z_n)$ se encuentran alrededor de $+1$, lo cual implica que la densidad de estados tiene que tener forzosamente mayor peso en la zona de altas energías. Si uno compara la densidad de estados obtenida para el segundo ejemplo

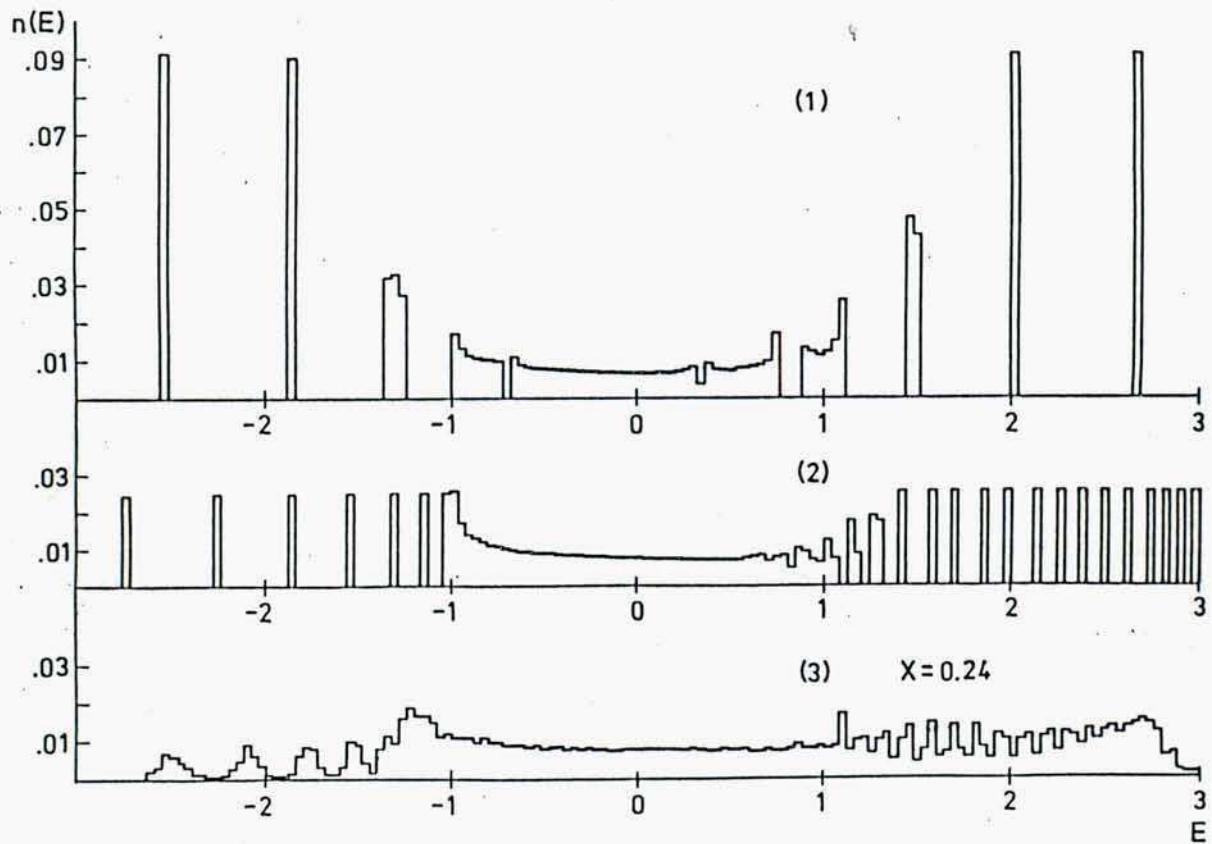


FIGURA IV.4: Densidad de estados para el modelo con solitones. Los casos (1) y (2) se corresponden con los mismos casos de la figura IV.3 y (3) muestra el efecto del desorden uniforme introducido en el caso (2)

con uno en el cual $q_a=0.$, o sea con un sistema equivalente dentro del modelo con modulación coseno del Capítulo II, que tenga $Q= 2\pi/40.8$ en la ecuación (2.12), la densidad de estados obtenida tiene el mismo número de gaps, pero es obviamente simétrica.

Hemos mostrado, entonces, que cuando $U_a \sim U_a^C$, existen en nuestro sistema zonas conmensuradas separadas por paredes de dominio (dislocaciones o solitones), obteniéndose una densidad de estados asimétrica. Cuando $U_a \ll U_a^C$ la densidad de estados que se obtiene es simétrica. De tal manera que al ir variando la temperatura pasando del primer límite $U_a \sim U_a^C$ al límite $U_a \ll U_a^C$ se debiera ver una densidad de estados cada vez más simétrica y con un número de gaps cada vez menor.

Hemos introducido desorden de tipo uniforme en estos sistemas observándose al igual que en los ejemplos del Capítulo III un ensanchamiento progresivo de las bandas al incrementar el grado de desorden introducido. Esto se muestra en la figura IV.4 para el caso $Q/2\pi=1/40.8$ y $q_a= .3$ para un grado de desorden $x= .24$, para el cual ya todos los gaps han desaparecido. Parecería que el desorden afecta más a estos sistemas con solitones que a los tratados en los capítulos anteriores, dado que para valores de x menores ya han desaparecido todos los gaps.

CAPITULO V

Localización en sistemas inconmensurados unidimensionales

V.1 Introducción

Los cristales conmensurados (sistemas ordenados) se caracterizan por tener todas sus funciones de onda extendidas, mientras que los sólidos desordenados unidimensionales tienen todos sus estados localizados para cualquier grado de desorden⁽⁵⁰⁾. Cómo se comportan los sistemas inconmensurados? Se cree que el modelo unidimensional descrito por el Hamiltoniano de la ecuación (2.8) tiene una transición abrupta, que llamaremos transición metal-aislador, para $\Delta\alpha=2$. Esta transición se caracteriza porque por debajo de $\Delta\alpha=2$. el espectro de H parece ser casi continuo, o sea que los estados extendidos forman un espectro denso, mientras que para $\Delta\alpha>2$. el espectro es denso pero discreto, existiendo, tal vez, un conjunto de autofunciones extendidas de medida nula. Lo anterior es cierto siempre que el número $Q/2\pi$ no sea un número de Liouville^[25,34].

Soukoulis y Economou han estudiado recientemente la dependencia espacial de las funciones de onda para el Hamiltoniano de uniones fuertes, cuyos elementos diagonales son de la forma:

$$\alpha(z_n) = \Delta\alpha_0 [\cos(Qn) + \Delta\alpha_1 \cos(2Qn)] \quad (5.1)$$

Con $\Delta\alpha_0/t = 1.9$, $\Delta\alpha_1 = 1/3$ y $Q = 0.7$ los autoestados correspondientes a energías altas se localizan con más facilidad que los correspondientes a bajas energías, existiendo un borde de movilidad, E_b , que separa regiones del espectro con estados localizados, de regiones con estados extendidos⁽²⁶⁾.

Sin embargo el problema de la localización en los sistemas inconmensurados no está muy definido. Recientemente Hogg y

Huberman intentaron demostrar que todos los estados correspondientes a un potencial cuasi-periódico son extendidos⁽²⁸⁾. El modelo considerado en el trabajo de Hogg y Huberman corresponde a una ecuación de Schroedinger con un potencial cuasi-periódico. Dado que la mayor parte de los estudios realizados hasta ahora con potenciales cuasi-periódicos y que dan estados localizados, han sido hechos en la aproximación de uniones fuertes o bien usando potenciales constituidos por funciones δ , existe la posibilidad de que la localización sea específica de estos modelos. Sokoloff y José también han mostrado que para una secuencia cuasi-periódica de barreras de potencial no infinitas, existen estados localizados y extendidos^(29,30).

Grempel et al., mostraron recientemente que para una modulación tipo tangente de las autoenergías de sitio, todos los estados están localizados cualquiera sea la amplitud de la modulación^(32,33). Para formas generales de la modulación, diferentes tratamientos aplicados por distintos autores han mostrado que existen bordes de movilidad^[19,47,48].

Nos interesa, en este capítulo, estudiar el comportamiento de los modelos inconmensurados presentados en el Capítulo II, en cuanto a localización se refiere. Se espera de estos sistemas, que presenten bordes de movilidad, dado que las funciones de modulación cuando son expandidas en serie de Fourier poseen más de un armónico y en vista de que el modelo dado por (5.1) que posee dos armónicos, presenta un borde de movilidad^[26,66].

Hemos usado $\gamma(E)$, llamado factor de crecimiento exponencial de las funciones de onda, obtenido por medio del método de la matriz transferencia como medida de la localización. Usando $\gamma(E)$ en combinación con los histogramas de la densidad de estados, $n(E)$, calculados por el método de Dean, hemos podido obtener información acerca de las diferencias entre los distintos modelos⁽⁴⁹⁾.

V.2 Factor de crecimiento exponencial $\gamma(E)$: Medida de la localización

V.2.1 $\gamma(E)$ para un sistema unidimensional ordenado

La exposición que sigue se basa tanto en el excelente artículo de Ishii⁽⁵⁰⁾ como en la Tesis Doctoral de Pichard⁽⁵¹⁾.

Fijemos nuestra atención sobre la ecuación de Schroedinger estacionaria y discretizada para una cadena semi-infinita:

$$t(\psi_{n+1} + \psi_{n-1}) + \alpha(n)\psi_n = E\psi_n \quad (5.2)$$

La ecuación (5.2) se puede escribir también en forma matricial:

$$\begin{pmatrix} \psi_{n+1} \\ \psi_n \end{pmatrix} = T_n \begin{pmatrix} \psi_n \\ \psi_{n-1} \end{pmatrix} \quad (5.3)$$

La matriz T_n es la llamada matriz transferencia y está dada por

$$T_n = \begin{bmatrix} (E - \alpha(n))/t & -1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \quad (5.4)$$

T_n es una matriz real de determinante igual a 1.

En el problema periódico con celda unidad de un sólo elemento, por ejemplo cuando $\alpha(n) = 0$ para todo n , los autovalores y autofunciones de la matriz T (sea $t=1$.) tienen las siguientes características:

a) Dentro de la banda de energías, o sea en la región en donde la ecuación de Schroedinger (5.2) posee autovalores dados

por $E = 2\cos(k)$, los autovalores de T son de la forma e^{-ik} y e^{ik} correspondiéndoles, respectivamente, los autovectores $\begin{pmatrix} e^{-ik} \\ 1 \end{pmatrix}$ y $\begin{pmatrix} e^{ik} \\ 1 \end{pmatrix}$. O sea que dentro de la banda, toda solución de (5.2) se proyecta sobre dos ondas planas que se propagan en direcciones opuestas:

$$\begin{pmatrix} \psi_{n+1} \\ \psi_n \end{pmatrix} = \tau_n \begin{pmatrix} e^{ik(n+1)} \\ e^{ikn} \end{pmatrix} + \beta_n \begin{pmatrix} e^{-ik(n+1)} \\ e^{-ikn} \end{pmatrix} \quad (5.5)$$

En este caso tenemos, entonces, que:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} (1/n) (\psi_n^2 + \psi_{n+1}^2) = 0. \quad (5.6)$$

b) Fuera de la banda de energías permitidas, $|E| > 2$, o sea $E = 2\cosh(k)$, los autovalores y autovectores de T son respectivamente e^k y e^{-k} , que corresponden a $\begin{pmatrix} e^k \\ 1 \end{pmatrix}$ y $\begin{pmatrix} e^{-k} \\ 1 \end{pmatrix}$

En este caso toda solución de (5.2) se proyecta sobre dos ondas, una que crece y otra que decrece, exponencialmente, según la misma dirección:

$$\begin{pmatrix} \psi_{n+1} \\ \psi_n \end{pmatrix} = \rho_n \begin{pmatrix} e^{k(n+1)} \\ e^{kn} \end{pmatrix} + \delta_n \begin{pmatrix} e^{-k(n+1)} \\ e^{-kn} \end{pmatrix} \quad (5.7)$$

En este caso, se tiene:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} (1/n) \log(\psi_n^2 + \psi_{n+1}^2) = 2k > 0. \quad (5.8)$$

Nótese que:

$$\begin{aligned} (1/n) \log(\Psi_n^2 + \Psi_{n+1}^2) &= \\ &= (2/n) \log |T_n T_{n-1} \dots T_1 \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_0 \end{pmatrix}| \end{aligned} \quad (5.9)$$

nos da el comportamiento asintótico de una solución particular de (5.2) para una dada energía E y valores iniciales Ψ_1 y Ψ_0 , tales que $(\Psi_1^2 + \Psi_0^2) \neq 0$. Se llama factor de crecimiento exponencial de las funciones de onda a

$$\gamma(E) = \lim_{n \rightarrow \infty} (1/n) \log |T_n T_{n-1} \dots T_1 \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_0 \end{pmatrix}| \quad (5.10)$$

Para un sistema periódico, como el ilustrado, dentro de la banda de autoenergías del sistema, $\gamma(E) = 0$, siendo las funciones de onda correspondientes, funciones extendidas. Fuera de la banda de energías permitidas se ha encontrado que $\gamma(E) > 0$ (50).

V.2.2 $\gamma(E)$ para un sistema no periódico

Hay dos tipos de sistemas no periódicos, los desordenados y los inconmensurados. En éstos hay que demostrar que se puede definir $\gamma(E)$.

Existe un teorema, el Teorema de Oseledec⁽⁶⁴⁾, que garantiza la existencia de la matriz asintótica Λ , definida como:

$$\begin{aligned} \Lambda &= \lim_{n \rightarrow \infty} (M_n^+ M_n)^{(1/2n)} \\ \text{con } M_n &= T_n \dots T_1 \end{aligned} \quad (5.11)$$

si cada una de las T_i está acotada, independientemente de que sean todas iguales o distintas (al azar). Esta condición se cumple en nuestro caso, dado que para los potenciales cuasi-periódicos usados, el valor absoluto de cualquiera de los elementos de matriz de las matrices T_i es finito⁽²⁵⁾.

Los logaritmos de los autovalores de la matriz de Oseledec son los llamados coeficientes de Lyapunov, $\gamma_i(E)$. En el caso unidimensional tendremos dos coeficientes γ_2 y $\gamma_1 = -\gamma_2 = \gamma(E)$, pues las matrices T_i son simplécticas⁽⁵¹⁾.

El teorema de Oseledec no dice nada sobre el valor de $\gamma(E)$ para sistemas desordenados. El teorema de Furstenberg, en cambio prueba la divergencia exponencial del producto de matrices asociadas a una cadena desordenada, estableciendo que para casi todo vector $|x\rangle$, se cumple con probabilidad 1 que⁽⁵⁰⁾:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} (1/n) \ln |M_n(E)|x\rangle| = \gamma(E) > 0 \quad (5.12)$$

Matsuda e Ishii^[50,53] han mostrado que este $\gamma(E)$, recién definido, está asociado con la localización de las funciones de onda.

Teniendo en cuenta que $\gamma(E)$ es cero dentro de las bandas de los sistemas ordenados y mayor que cero para un sistema desordenado y fuera de la banda de energías permitidas de un sistema periódico, entonces $\gamma(E)=0$. caracterizará a los estados extendidos y $\gamma(E)>0$. a los localizados y a los gaps.

Thouless define como longitud de localización a la inversa de $\gamma(E)$ en los casos en los que E es una autoenergía del sistema⁽⁵⁷⁾.

Tal como lo puntualiza Ishii⁽⁵⁰⁾, el hecho de que soluciones particulares de un sistema desordenado crezcan exponencialmente, no implica necesariamente que los autoestados de un sistema finito pero muy largo y desordenado estén localizados.

Esta relación entre el crecimiento exponencial de soluciones particulares y la existencia de autoestados exponencialmente localizados para sistemas finitos fue sugerida por Borland⁽⁵²⁾ y fue estudiada por Matsuda e Ishii⁽⁵³⁾ para sistemas infinitos. Según Ishii la correspondencia entre estados localizados en un sistema finito y la existencia de autoestados exponencialmente localizados en sistemas infinitos está íntimamente correlacionada.⁽⁵³⁾ Esto ha sido aceptado por muchos autores en los últimos tiempos y sobre la aceptación de esta correspondencia es que descansan los cálculos realizados en este capítulo.

V.3 Método para el cálculo de $\gamma(E)$

Si usamos $\psi_0 = 0$. y $\psi_1 = 1$. como condiciones de borde, se puede obtener de manera recurrente $\gamma(E)$, de forma tal que el cálculo numérico resulta sencillo. Aplicando sucesivamente T_i a $\begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ se obtiene:

$$\begin{pmatrix} \psi_{n+1} \\ \psi_n \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} (E - \epsilon_n)/t & -1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \cdots \begin{bmatrix} (E - \epsilon_1)/t & -1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$= T_n \cdots T_2 \begin{pmatrix} (E - \epsilon_1)/t \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$= T_n \cdots T_3 \begin{pmatrix} (E - \epsilon_2)/t - 1/C_1 \\ 1 \end{pmatrix} C_1$$

$$= \begin{pmatrix} (E - \epsilon)/t - 1/(C_{n-1}) \\ 1 \end{pmatrix} C_1 C_2 \cdots C_{n-1}$$

$$\begin{aligned}
 C_1 &= (E - \varepsilon_1)/t \\
 C_2 &= (E - \varepsilon_2)/t - 1/C_1 \\
 &\cdot \\
 &\cdot \\
 C_i &= (E - \varepsilon_i)/t - 1/C_{i-1}
 \end{aligned} \tag{5.13}$$

Teniendo en cuenta (5.9), (5.10) y (5.13) se obtiene para $\gamma(E)$:

$$\begin{aligned}
 \gamma(E) &= \lim_{n \rightarrow \infty} (1/2n) \ln \left\{ \left[(E - \varepsilon_n)/t - 1/C_{n-1} \right]^{2+1} \right\} * (C_1 \dots C_{n-1}) \\
 &= \lim_{n \rightarrow \infty} (1/2) \ln \left[(E - \varepsilon_n)/t - 1/C_{n-1} \right]^{2+1} (1/n) \\
 &\quad + \sum_{i=1}^{n-1} \ln C_i (1/n)
 \end{aligned} \tag{5.14}$$

Calculando $\gamma(E)$ haciendo uso de la expresión (5.14) hemos obtenido las propiedades de localización de los distintos modelos inconmensurados introducidos en los Capítulos II y IV.

En la práctica, para cadenas finitas, nunca se obtiene $\gamma(E) = 0.$, sino $\gamma(E) \approx 1/N$, para los estados extendidos, siendo N el número de átomos considerados en la cadena.

V.4 Resultados

Para el cálculo de $\gamma(E)$ hemos tomado en todos los casos cadenas de 5000 átomos, dado que ya para esta cantidad de átomos obtenemos una buena convergencia para $\gamma(E)$. Con el objeto de obtener un criterio numérico para determinar la localización o no de un estado hemos planteado $\ln |\Psi_n^2(E)|$ en función de n para distintos valores de E , $\Delta\alpha$ y Q , para los distintos tipos de modulación. Si para una energía dada, correspondiente a un estado

extendido, graficamos $\ln |\psi_n^2(E)|$ en función de n , obtendremos valores casi constantes para $\ln |\psi_n^2(E)|$ para todo n o bien valores que oscilan alrededor de un cierto valor medio. Si se tratase, en cambio, de la energía correspondiente a un estado localizado $\ln |\psi_n^2(E)|$ en función de n tendrá que crecer hasta llegar a valores muy cercanos a cero y luego decrecer. Tengamos en cuenta que los coeficientes de la función de onda están normalizados y por tal razón $\ln |\psi_n^2(E)| \leq 0$. Si nos encontrásemos ubicados en una energía que se encuentra dentro de un gap, $\ln |\psi_n^2(E)|$ deberá crecer partiendo de números muy negativos y tender a un valor negativo cercano a cero, que dependerá del número de átomos usados y de la normalización.

En la práctica es muy difícil ubicarse exactamente en la autoenergía correspondiente a un estado localizado, de tal manera que ese decrecimiento no lo veo nunca.

En todos los ejemplos calculados hemos observado que para $\gamma(E) \leq .001$, $\ln |\psi_n^2|$ en función de n oscila alrededor de un valor medio, de tal manera que caracterizamos como extendidos a aquellos estados para los cuales $\gamma(E) \leq .001$.

Para $\gamma(E) \geq .0025$ $\ln |\psi_n^2|$ crece exponencialmente en todos los ejemplos tratados. $\gamma(E) \geq .0025$ caracteriza, entonces, a los estados localizados y a las energías que se encuentran dentro de gaps.

Para valores de $\gamma(E)$ que se encuentran en el pequeño intervalo $.001 \leq \gamma(E) \leq .0025$ resulta difícil decir si los estados son localizados o extendidos.

A los efectos de chequear el criterio enunciado, hemos calculado $\gamma(E)$ para la modulación tipo coseno. Los resultados que debemos obtener para este modelo son bien conocidos. Sabemos que para $\Delta\alpha/t \leq 2$, el espectro es casi continuo y para $\Delta\alpha/t \geq 2$, los estados son todos o casi todos localizados, independientemente del valor de Q y h . Hemos tomado $\alpha_0 = 0$, $t=1$ y $h=0$ en

todos los cálculos. En la figura V.1 aparece $n(E)$ y $\gamma(E)$ para dos valores de $\Delta\alpha$, uno por debajo y otro por encima del valor crítico $\Delta\alpha_c=2$. Hemos hecho los cálculos en el caso particular de este modelo para $Q/(2\pi)=(\sqrt{(13.)}-3.)/2$, que corresponde a hacer $r=3$ en (2.16). Para $\Delta\alpha=1.9$ y haciendo un barrido con $\Delta(E)=.026t$, se perfila la posición de las bandas de energía, pero para detectar las bandas de estados extendidos, que son muy angostas, hay que hacer un barrido más fino. Del primer barrido se ve, por ejemplo, que en los alrededores de $-.26$ podría haber bandas de estados extendidos. Esto se desprende del hecho de que $\gamma(E)$ como función de E va disminuyendo su valor para luego volver a incrementarse. Barriendo, entonces, con un $\Delta(E)=.0026$ en los alrededores de esta energía se obtuvo:

E	$\gamma(E)$
-.26	.0738
-.2574	.0649
-.2548	.0529
-.2522	.0286
-.2500	.0009
-.2470	.0006
-.2444	.0009
-.2418	.0247

TABLA V.1: Valores de $\gamma(E)$ en función de E en los alrededores de $E= -.26$ para la modulación coseno. $\Delta\alpha=1.9, r=3$.

Se ve claramente de la tabla que entre $E=-.2500$ y $-.2444$ (y sus simétricos con respecto a $E=0$.) hay una banda de estados extendidos. Hemos repetido este procedimiento a lo ancho de toda la banda. Los resultados aparecen en la figura V.1.

Hemos adoptado el criterio de no graficar los valores de $\gamma(E)$ en los minigaps. Nótese que los minigaps tampoco aparecen en el histograma de $n(E)$, dado que la precisión del mismo no lo permite.

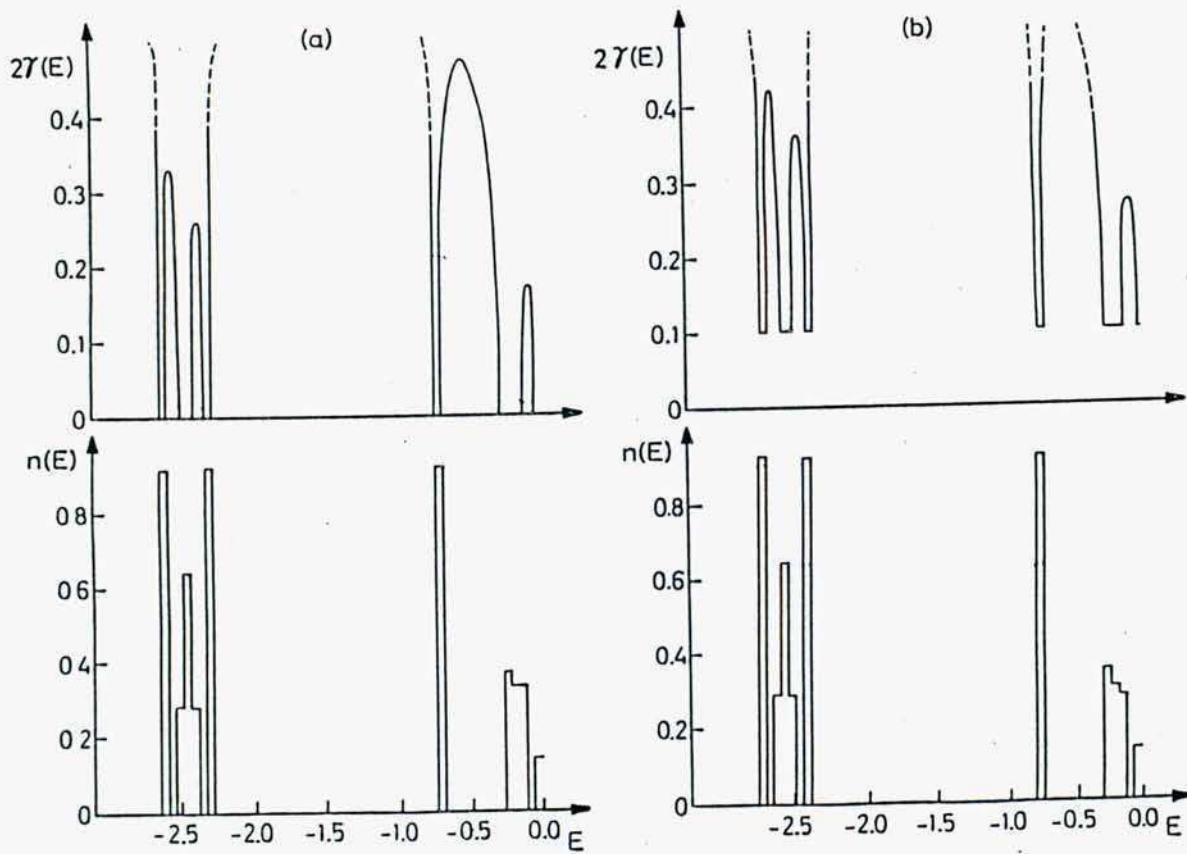


FIGURA V.1: $n(E)$ y $\gamma(E)$ para la modulación tipo coseno, para la mitad de la banda y $r=3$ en ecuación (2.16). (a) $\Delta\alpha= 1.9$, (b) $\Delta\alpha= 2.1$

Concluimos de comparar los resultados obtenidos para $\gamma(E)$ con la densidad de estados, que para $\Delta\alpha=1.9$, los estados extendidos forman banda para la modulación tipo coseno.

Para $\Delta\alpha=2.1$ (ver figura V.1) hemos hecho lo propio, haciendo una primera barrida con $\Delta(E)=.0273$ y luego aumentando la precisión del barrido en las zonas en donde se perfila la posición de las bandas a partir de la primera barrida. Obtenemos de esta forma que $\gamma(E) > 0.049$ y que $\gamma(E)=0.049$ en las zonas de la banda en donde hay estados. Comparando los resultados obtenidos para $\gamma(E)$ con el histograma de la densidad de estados, vemos que para $\Delta\alpha=2.1$ todos los estados son localizados, la mayoría de ellos con un grado de localización correspondiente a $\gamma(E)\sim 0.049$. Podrían existir estados extendidos aislados, los que evidentemente no forman banda, ni un espectro denso.

Es interesante notar que de los gráficos de $\gamma(E)$ uno puede determinar cualitativamente el número y posición de los gaps. En las figuras V.1 y las que siguen, los valores de $\gamma(E)$ en el centro de los gaps superan nuestra escala. Cuando comienza un gap, $\gamma(E)$ crece notablemente, mientras que es comparativamente constante dentro de las bandas.

También hemos estudiado el comportamiento de $\gamma(0)$ para distintos valores de Q y $\Delta\alpha$ para el modelo correspondiente a la modulación coseno. Usamos para Q , nuevamente la expansión en fracciones continuas dada por la ecuación (2.16) con $r=2, 3$ y 6 . Los resultados aparecen en la tabla V.2 y muestran un crecimiento abrupto en $\Delta\alpha=2$ para cualquier valor de Q .

De lo expuesto surge que hemos podido reproducir los dos resultados bien conocidos y ya discutidos. Hay una transición metal-aislador en este modelo para $\Delta\alpha/t=2.$, no dependiendo estos resultados del valor de Q . Podemos afirmar, entonces, que el cálculo de $\gamma(E)$ en combinación con el de $n(E)$ nos provee de

$\Delta\alpha \backslash r$	2	3	6
1.5	0.00011	0.00036	0.00054
1.6	0.00038	0.00043	0.00031
1.7	0.00064	0.00052	0.00032
1.8	0.00092	0.00062	0.00078
1.9	0.0012	0.00071	0.00091
2.0	0.0096	0.006	0.0094
2.1	0.097	0.0999	0.098

TABLA V.2: $2\gamma(0)$ en función de $\Delta\alpha$ y Q para la modulación tipo coseno. Q está dado por la ecuación (2.16)

$\Delta\alpha \backslash r$	2	3	6
2.1			0.00027
2.2			0.00053
2.3		0.00047	0.00091
2.4		0.00053	0.0016
2.5	0.00074	0.00058	0.020
2.6	0.00090	0.00065	0.090
2.7	0.0011	0.00071	
2.8	0.0013	0.00074	
2.9	0.0016	0.0092	
3.0	0.045	0.081	
3.1	0.11		

TABLA V.3: $2\gamma(0)$ en función de $\Delta\alpha$ y Q para el modelo zigzag. Q está dado por la ecuación (2.16)

un método adecuado y de bajo costo computacional para obtener las propiedades de localización de las funciones de onda para los distintos modelos de Hamiltoniano.

Para el modelo zigzag hemos hecho los cálculos para los mismos valores de Q que para el Hamiltoniano con modulación coseno. Los resultados aparecen en la figura V.2 y la tabla V.3. De la figura V.2 se hace evidente que el sistema tiene dos bordes de movilidad simétricos que separan regiones con estados localizados de regiones en las cuales los estados extendidos forman banda. Los bordes de movilidad se corren hacia $E=0$. a medida que crece el valor de $\Delta\alpha$. De $\gamma(0)$ en función de Q y $\Delta\alpha$, tabla V.3, se ve que el valor de $\Delta\alpha_c$, para el cual el estado correspondiente a $E=0$. se localiza depende de Q . De hecho, para $r=2$, $E=0$., se localiza para $\Delta\alpha_c=3$., para $r=3$ se localiza para $\Delta\alpha_c=2.9$ y para $r=6$ para $\Delta\alpha_c=2.5$.

Notamos, entonces, que para el Hamiltoniano zigzag los estados comienzan a localizarse para $\Delta\alpha \approx 2$. y se tornan todos localizados para $\Delta\alpha > 2$., existiendo una diferencia considerable con respecto a la modulación tipo coseno.

Los resultados para la modulación diente de sierra aparecen en la figura V.3. Este modelo exhibe también bordes de movilidad que se van corriendo hacia $E=0$. a medida que $\Delta\alpha$ crece. Pero en este caso, los valores relevantes de $\Delta\alpha_c$ son mucho menores que para la modulación zigzag y coseno. De nuestros cálculos se desprende que para $r=6$, todos o casi todos los estados se han localizado para $\Delta\alpha_c=1.1$, para $r=3$, $\Delta\alpha_c=1$. y para $r=2$., $\Delta\alpha_c=0.9$. La dependencia de $\Delta\alpha_c$ con r es menor que en el caso de la modulación zigzag y en sentido opuesto.

En contraste con el modelo con modulación zigzag, en el modelo diente de sierra, el borde de movilidad separa una región en la cual el espectro de estados localizados es denso de otra región que parece contener tanto estados extendidos como localizados.

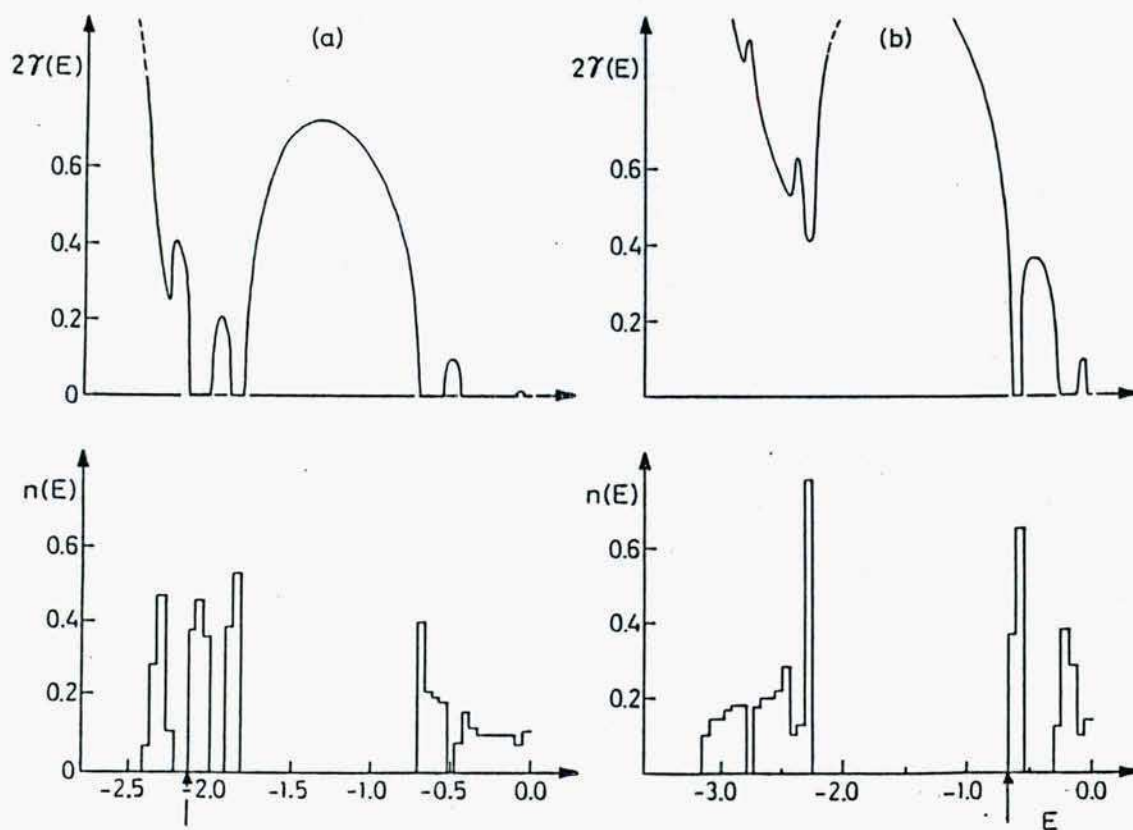


FIGURA V.2: $n(E)$ y $\gamma(E)$ para la modulación tipo zigzag para la mitad de la banda de energías y $r=3$ en ec. (2.16). (a) $\Delta\alpha = 1.5$, (b) $\Delta\alpha = 2.5$. El borde de movilidad está indicado con una flecha.

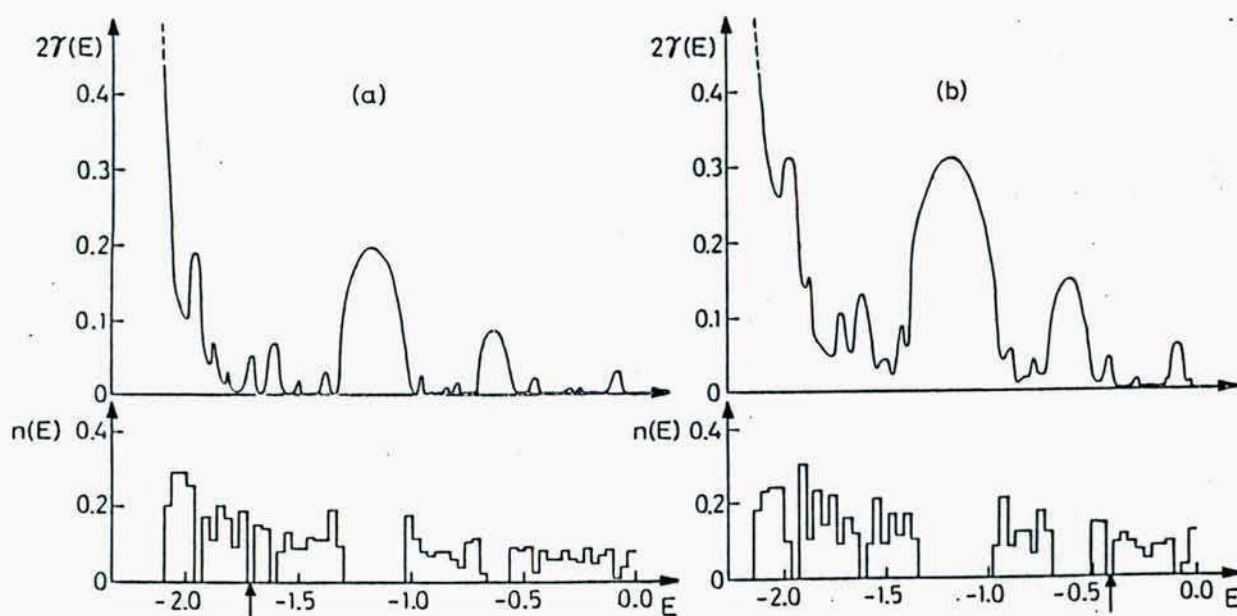


FIGURA V.3: $n(E)$ y $\gamma(E)$ para la modulación tipo diente de sierra para la mitad de la banda de energías y $r=3$ en ec. (2.16). (a) $\Delta\alpha = 0.5$, (b) $\Delta\alpha = 0.8$. El borde de movilidad se indica con una flecha.

El valor de $\Delta\alpha_c$ para el cual todos los estados se localizan decrece a medida que se pasa del Hamiltoniano zigzag ($2.5 \leq \Delta\alpha_c \leq 3.$) al coseno ($\Delta\alpha_c = 2.$) y de éste al diente de sierra ($0.9 \leq \Delta\alpha_c \leq 1.$) y recordemos, que para la modulación tangente todos los estados son localizados cualquiera sea el valor de $\Delta\alpha$ igual que para los sistemas desordenados unidimensionales. Esto sugiere que la modulación diente de sierra puede considerarse más cerca de un sistema totalmente desordenado que el coseno y este último más cerca del sistema desordenado que el correspondiente al Hamiltoniano zigzag. Este resultado es consistente con lo estudiado en el Capítulo III, en el cual nos dedicamos a los sistemas inconmensurados-desordenados. En el Capítulo III habíamos concluido que la modulación tipo diente de sierra está más cerca del modelo de Anderson completamente desordenado que el modelo zigzag, en el sentido de que se necesita menos desorden para que la densidad de estados del modelo diente de sierra se asemeje a la del modelo de Anderson totalmente desordenado que para el modelo zigzag.

V.5 Conclusiones

En este capítulo hemos calculado el factor de crecimiento exponencial, $\gamma(E)$, obtenido por medio del método de la matriz transferencia, para los sistemas inconmensurados unidimensionales introducidos en el Capítulo II. Cuando se usa este método en combinación con los histogramas de la densidad de estados, obtenidos por el método de Dean, se obtienen las propiedades de localización de estos sistemas.

Mostramos que las propiedades de localización de estos modelos son fuertemente dependientes de la modulación y que cuando la modulación no es un simple coseno, existen bordes de movilidad y el valor de la amplitud de la modulación para el cual los estados se localizan depende del valor de Q .

De lo dicho se desprende que los sistemas tight-binding unidimensionales, cuyos Hamiltonianos no son autosimilares⁽¹⁷⁾, como es el caso del coseno, no presentan una transición metal-aislador independiente de Q y E en la cual se pasa de tener un espectro casi continuo a uno puntual denso.

Con la precisión usada en nuestros cálculos, no podemos descartar la existencia de estados localizados aislados en el caso del potencial con modulación tipo coseno, para $\Delta\alpha < 2$, sí podemos asegurar que los estados extendidos forman banda. Tampoco podemos descartar la existencia de estados extendidos aislados para $\Delta\alpha > 2$, pero sí asegurar, que para estos valores de $\Delta\alpha$ los estados localizados forman un espectro denso. Nuestros resultados entonces no se contradicen con lo que aparece en la literatura más reciente y rigurosa sobre el particular⁽²⁵⁾.

En el caso del Hamiltoniano tipo zigzag, tampoco podemos descartar la existencia de estados localizados en la zona en donde los estados extendidos forman banda, lo que sí podemos afirmar es que, comparativamente el Hamiltoniano diente de sierra, presenta muchos más estados localizados en esa zona.

CAPITULO VI

Sistema unidimensional con solitones: Localización

VI.1 Introducción

Volvamos al sistema estudiado en el Capítulo IV, que consiste en paredes de dominio o discommensuraciones, separadas por regiones en las cuales el potencial de la red y el potencial de modulación son conmensurados^(7,8). En este capítulo estudiaremos las propiedades de localización de sistemas unidimensionales que presentan solitones, utilizando el método de la matriz transferencia en combinación con histogramas de la densidad de estados obtenidos por el método de Dean (ver capítulo V).

Una propiedad interesante que mostraron Su y Schrieffer, teóricamente, es que aparecen cargas fraccionarias en sistemas unidimensionales con ondas de densidad de carga⁽⁵⁴⁾, que presentan paredes de dominio. En particular en sistemas con un tercio de banda llena, la carga en las paredes de dominio es de $\pm e/3$ ó $\pm 2e/3$. Esto se relaciona con la localización de las funciones de onda, porque la presencia de solitones (defectos o dislocaciones) da origen a la aparición de estados en los gaps de la densidad de estados del sistema y siendo estos estados, estados aislados, los mismos son localizados. Estos autores han estudiado, como ejemplo, la formación de solitones en poliacetileno, encontrándose con la presencia de estados localizados, asociados a la existencia de los solitones^(55,56). Teniendo en cuenta estos antecedentes, hemos considerado interesante investigar las peculiaridades de la distribución de la carga electrónica en nuestro modelo con solitones⁽⁴⁹⁾, además del cálculo de la localización con los métodos del capítulo V.

VI.2 Modelo usado

En el capítulo IV calculamos la densidad de estados de un sistema electrónico, para el cual las posiciones de equilibrio de los átomos no son equidistantes, sino que se obtienen postulando interacciones armónicas entre los átomos y un potencial externo sinusoidal, cuya periodicidad es inconmensurada con la de la red. Del formalismo de Theodorou y Rice⁽⁸⁾, en la aproximación del continuo, obteníamos para z_n (posición del n -ésimo átomo):

$$z_n = b(1 - 1/R_a)n - (2b/\pi) \left\{ \sum_{m=1}^{\infty} (1/m) \left[q_a^m / (1 + q_a^{2m}) \right] * \right. \\ \left. * \sin(2\pi mn/R_a) \right\} + b/2 \quad (6.1)$$

en donde $R_a \gg 1$ y $0 < q_a < 1$ son función de las distancias inconmensuradas "a" y "b" y de los potenciales externo e interno. Recordemos que para las autoenergías de sitio habíamos impuesto una modulación de la forma:

$$\alpha(z_n) = \Delta\alpha \cos((2\pi/b)z_n) \quad (6.2)$$

Cuando se usa la aproximación del continuo, la densidad de estados que se obtiene es asimétrica, pero no lo suficiente como para que las diferencias en la localización con respecto a un sistema inconmensurado con modulación coseno sea notable. Esto fue puntualizado también por Sokoloff⁽²⁷⁾. Con el objeto de que se haga evidente el efecto de la presencia de dislocaciones en el sistema, hemos calculado $\gamma(E)$, para un sistema en el cual z_n está dado formalmente por la ecuación (6.1), pero tal que no es solución del Hamiltoniano de Theodorou y Rice. R_a , el número medio de átomos entre dislocaciones y q_a , el grado de apartamiento con respecto al sistema conmensurado, se han tomado como parámetros independientes, elegidos de tal forma de hacer resaltar el efecto de las dislocaciones-

VI.3 Cálculos y resultados

VI.3.1 Localización

En los cálculos de localización se han usado cadenas de 10000 átomos. La densidad de estados fue calculada por el método de Dean y el factor de crecimiento exponencial de las funciones de onda, $\gamma(E)$, fue calculado por el método de la matriz transferencia.

Hemos elegido para nuestros cálculos $R_a = 2/(\sqrt{13}-3)$ y $q_a = .3$. Con estos datos para los parámetros se obtiene una densidad de estados muy asimétrica y con pocas bandas importantes.

En la figura VI.1 aparece $n(E)$ y $\gamma(E)$ para este sistema. El mismo presenta un borde de movilidad, y no dos como en todos los casos simétricos que vimos antes, con estados localizados a la izquierda del mismo y extendidos a la derecha. Este borde de movilidad se mueve hacia la derecha, a medida que se aumenta el valor de $\Delta\alpha$. El nivel de Fermi para una banda llena hasta la mitad (un electrón por orbital) cae en la región de estados extendidos aún para $\Delta\alpha=6$.

Si q_a se reduce a .1, la densidad de estados que se obtiene es más simétrica que en el caso anterior, pero el nivel de Fermi cae en la zona de estados localizados ya para $\Delta\alpha=2$. Todo indica, entonces, que estos sistemas son mejores conductores, cuanto más asimétricos son.

VI.3.2 Distribución de la carga en los sistemas con solitones

Otro aspecto interesante de los modelos con solitones es la aparición de cargas fraccionarias y de estados localizados asociados con las dislocaciones(54,56).

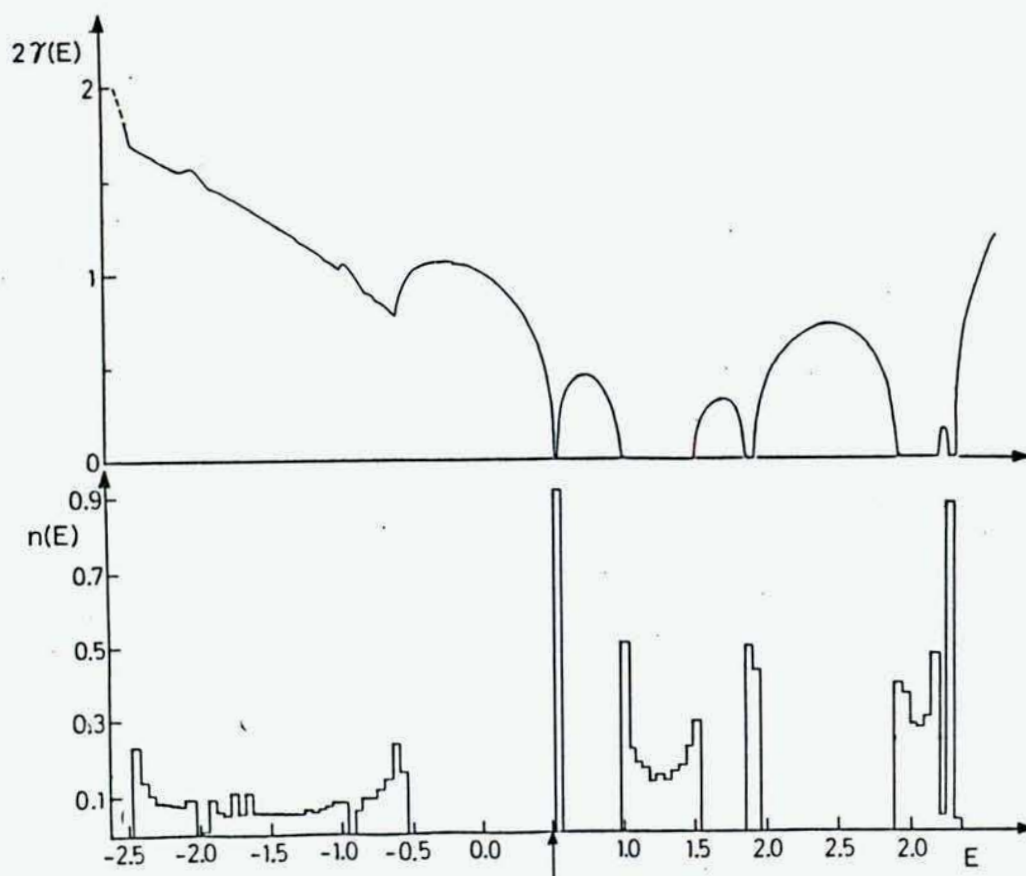


FIGURA VI.1: $n(E)$ y $\gamma(E)$ para el modelo con solitones. $R_a = 2/(\sqrt{13} - 3)$
 $q_a = 0.3$, $\Delta\alpha = 2$. El borde de movilidad está indicado con
 una flecha

Con el objeto de estudiar la distribución de la carga entre los átomos de nuestro modelo de uniones fuertes, hemos usado una cadena muy corta, de nada más que 30 átomos, y diagonalizado la matriz del Hamiltoniano correspondiente para el caso $R_a = 2/(\sqrt{13}-3)$, $q_a = .3$. Hemos usado una cadena donde el sistema casi se repite 10 veces para que la diagonalización no resultase tan costosa, pero debido a que el valor de $\Delta\alpha$ en el ejemplo es muy grande, estando las funciones de onda en general muy localizadas, a pesar de tratarse de una cadena corta es lo suficientemente larga como para poder sacar algunas conclusiones de los resultados obtenidos. Una vez que los autovalores y autofunciones han sido obtenidos, la carga sobre cada uno de los átomos se calcula fácilmente suponiendo que la banda está semi-llena, como sigue: Sea $C_{i,\mu}$ el coeficiente de la función de onda correspondiente a la autoenergía μ , sobre el orbital i . La carga q_i , sobre cada átomo es:

$$q_i = \sum_{\mu}^{1/2 \text{ banda}} C_{i,\mu}^2 \quad (6.3)$$

En la figura VI.2 aparecen graficados, $\alpha(z_n)/\Delta\alpha = \cos(2\pi z_n/b)$ y q_n , la carga sobre el átomo n . Cuando $\alpha(z_n)/\Delta\alpha$ es aproximadamente $+1$, el átomo en cuestión está prácticamente en registro con el potencial externo de periodicidad b , mientras que $\alpha(z_n)/\Delta\alpha = -1$ representa una dislocación o defecto. De la figura VI.2 se torna evidente, que las dislocaciones actúan como atractores de electrones, dado que más carga negativa q_n está asociada a aquellos átomos que tienen $\alpha(z_n) \sim -1$.

Hemos mostrado un ejemplo extremo, $\Delta\alpha = 6.$, aunque no se trate de un caso de mucha realidad física, porque en él se puede apreciar bien la distribución de la carga y entender bien la idea de las cargas fraccionarias. Naturalmente estos efectos aparecen también para valores más pequeños de $\Delta\alpha$, siendo en este caso no tan pronunciados.

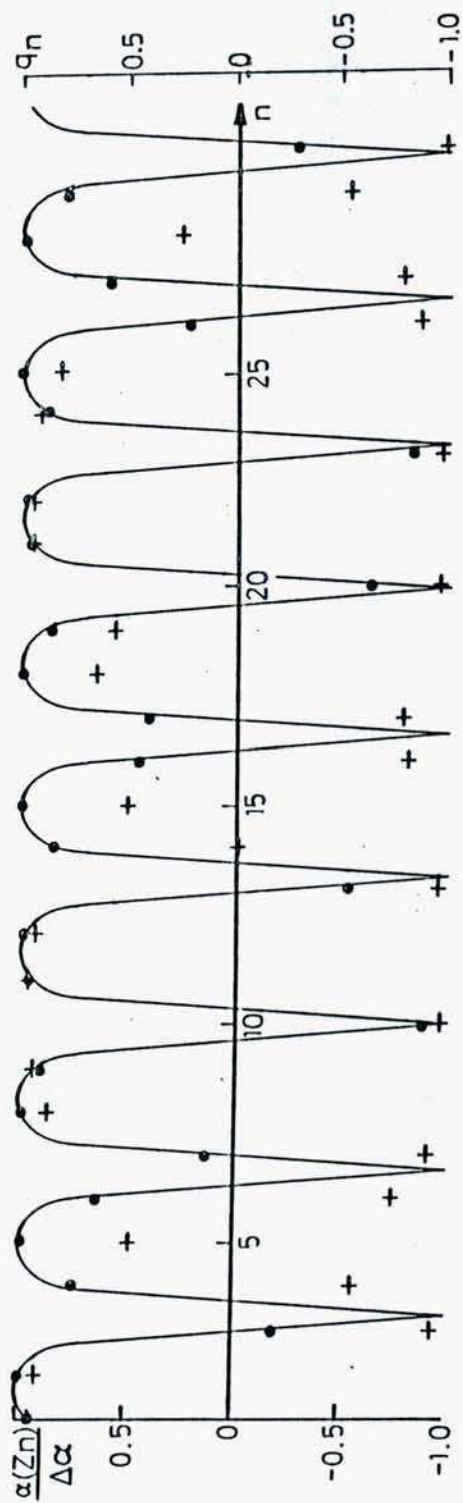


FIGURA VI.2: $\alpha(z_n)/\Delta\alpha$, línea llena y puntos, y q_n en unidades de $|e|$, cruces, para el modelo con solitones, $R_a = 2/(\sqrt{13} - 3)$, $q_a = 0.3$, $\Delta\alpha = 6$.

E	n	$\alpha(z_n)/\Delta\alpha$
-5.578	10	-0.899
-5.188	23	-0.834
-4.028	20	-0.636
-3.447	13	-0.537
-1.921	30	-0.295

TABLA VI.1: Resultados obtenidos al diagonalizar una matriz de 30×30 para el caso $R_a = 2/(\sqrt{13} - 3)$, $q_a = 0.3$, $\Delta\alpha = 6$. La primera columna contiene los autovalores más bajos y la segunda columna contiene los sitios en los cuales están localizadas las funciones de onda correspondientes.

Con respecto a la localización de las funciones de onda, observamos que los autovalores bajos, poseen autofunciones completamente localizadas en los sitios de defecto. Ver tabla VI.1. De hecho, el autovalor más bajo posee una autofunción localizada en el sitio número 10 de la cadena, siendo el valor de $\alpha(z_{10})$ el más cercano a -1. A medida que aumenta el valor de las autoenergías, los sitios en los cuales las autofunciones están localizadas tienen valores crecientes de $\alpha(z_n)$. Obtenemos, entonces, por este método también, que los estados más localizados son aquellos de menor energía y también obtenemos que están localizados en las dislocaciones o sitios de defecto. Su y Schrieffer observan también que la carga se acumula en las regiones en donde se encuentran las paredes de dominio.

CAPITULO VII

Sistemas inconmensurados bidimensionales: Su densidad de estados

VII.1 Introducción

Los sistemas reales nunca son completamente unidimensionales, debido a que siempre existe una interacción entre las cadenas de átomos de un sistema. En este Capítulo estudiaremos la influencia que tiene la segunda dimensión en las propiedades de los sistemas inconmensurados. Calcularemos densidades de estado para distintos modelos bidimensionales y además los efectos de la inconmensuración en dos redes bien conocidas: la red cuadrada y la red del grafito.

VII.2 Modelos bidimensionales: Modelos en fase y en anti-fase

Como en los capítulos anteriores usamos un Hamiltoniano de uniones fuertes, que para un sistema bidimensional adopta la siguiente forma:

$$\begin{aligned} & \beta_2(\Psi_{n+1,m} + \Psi_{n-1,m}) + \beta_1(\Psi_{n,m-1} + \Psi_{n,m+1}) + \\ & + \alpha(z_{n,m})\Psi_{n,m} = E\Psi_{n,m} \end{aligned} \quad (7.1)$$

β_1 es la integral de interacción entre primeros vecinos en la dirección "y", β_2 es la integral de interacción entre primeros vecinos en la dirección "x", $\alpha(z_{n,m})$ es la autoenergía de sitio correspondiente al átomo que ocupa la posición (n,m) en el espacio bidimensional. "n" denota la posición n-ésima sobre el eje "x" y m la posición m-ésima sobre el eje "y". Los coefi-

cientes $\psi_{n,m}$ son los coeficientes de expansión de la función de onda de uniones fuertes.

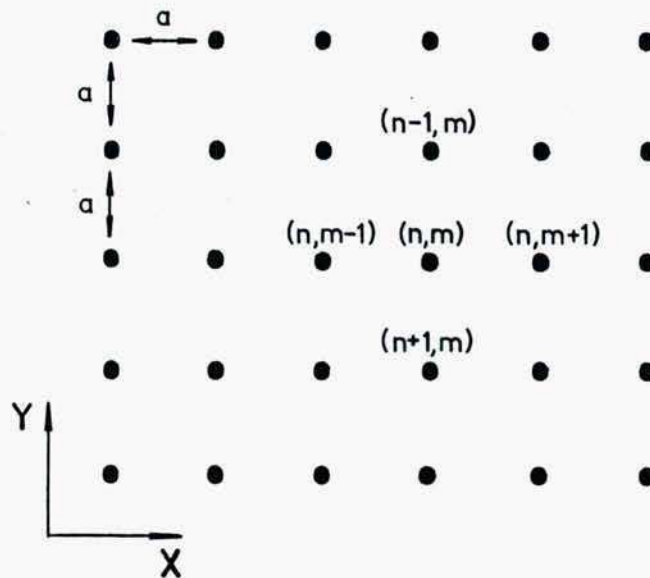


FIGURA VII.1: Red bidimensional

La mayor parte de los sistemas que estudiamos presentan la característica de estar sometidos a un potencial externo periódico, que según la dirección "x", es inconmensurado con el potencial de la red, teniendo según "y" la siguiente periodicidad:

i) Modelo en fase

Este sistema consiste en cadenas de átomos que están en fase unas con respecto a las otras, siendo en este caso:

$$\alpha(z_{n,m}) = \alpha_0 + \Delta \alpha \cos(2\pi Q x_n + h) \quad (7.2)$$

En (7.2) $x_n = na$ para todo entero m .

La celda unidad de este modelo es una cadena unidimensional infinita y se repite idénticamente según y.

ii) Modelo en antifase

En contraste con el modelo i) estudiamos el otro caso extremo para pares de cadenas, donde las autonergías de sitio de una fila están en antifase con respecto a las autoenergías de sitio de la cadena anterior. La celda unidad en este caso consiste en dos cadenas unidimensionales infinitas, siendo:

$$\begin{aligned}\alpha(z_{n,m}) &= \alpha_0 + \Delta \alpha \cos(Qx_n + h) & m \text{ par} \\ \alpha(z_{n,m}) &= \alpha_0 - \Delta \alpha \cos(Qx_n + h) & m \text{ impar}\end{aligned}\quad (7.3)$$

nuevamente $x_n = n \cdot a$ para todo m .

Tanto en el modelo i) como ii) hemos tomado $\alpha_0 = h = 0$.

iii) Modelo inconmensurado según dos direcciones

En este modelo hemos introducido inconmensuración según las dos direcciones del sistema, eligiendo para las autoenergías de sitio la siguiente forma funcional:

$$\alpha(z_{n,m}) = \alpha_0 + \Delta \alpha \cos(nQ_1 a + mQ_2 a + h) \quad (7.4)$$

Nuevamente, sin pérdida de generalidad tomaremos $\alpha_0 = h = 0$. En todos estos modelos Q , Q_1 y Q_2 son iguales a 2π veces un número irracional.

Para el modelo iii) podríamos haber planteado la siguiente forma para las autoenergías de sitio en lugar de (7.4):

$$\alpha(z_{n,m}) = \Delta \alpha (\cos(Q_1 n a + h_1) + \cos(Q_2 m a + h_2)) \quad (7.5)$$

Hemos decidido quedarnos con (7.4), pues este modelo tiende al modelo i) o al ii) dependiendo de que $Q/(2\pi)$ sea un racional

perteneciente a los enteros o igual a $I/2$ con I entero impar, respectivamente. (7.5) no tiende a ninguno de estos dos modelos cualquiera sea Q_2 .

Hemos aplicado en los casos bidimensionales tan sólo modulaciones de tipo cosenoidal. Seguramente las modulaciones zigzag y diente de sierra, también, darían resultados interesantes, pero ya con el coseno podremos sacar conclusiones sobre el efecto de la segunda dimensión.

Dado que tanto el modelo i) como el ii) son periódicos según "y", se puede aplicar el teorema de Bloch según esta dirección.

La función de onda de Bloch tendrá la siguiente expresión:

$$\phi_k = \sum \alpha_{k-g} e^{i(k-g) \cdot r} \quad (7.6)$$

La sumatoria en g , es sobre los vectores de la red recíproca.

Dentro de la aproximación de uniones fuertes tenemos:

$$\phi_k^i = (1/\sqrt{M}) \sum_j e^{i(k a_j)} \phi_1(r - R_j^i) \quad (7.7)$$

ϕ_k^i es la función de onda de Bloch sobre el orbital del sitio i , M es el número de celdas unidad del sistema, $\phi_1(r - R_j^i)$ es el orbital atómico correspondiente al átomo i en la celda unidad j . La sumatoria en j es sobre todas las celdas unidad.

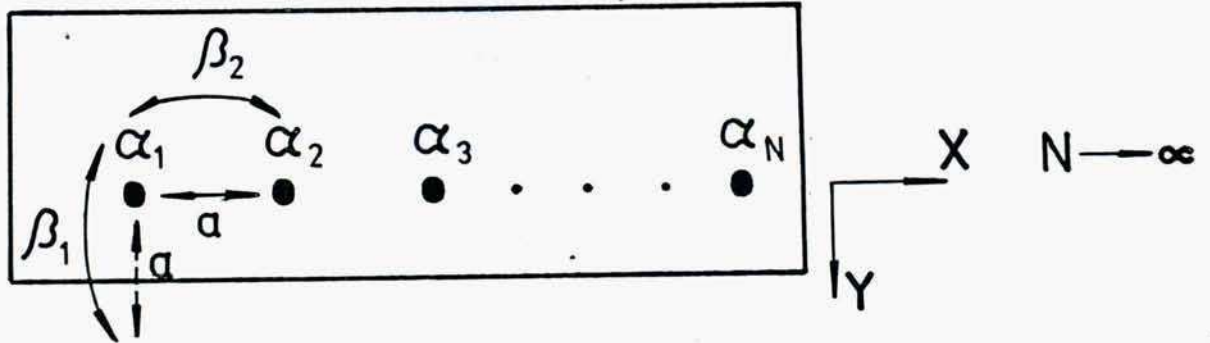


FIGURA VII.2: Celda unidad del modelo en fase. Modelo (i)

La celda unidad del modelo (i) es la que aparece en la figura VII.2. Los elementos de matriz del Hamiltoniano, para cada valor de k , serán entonces, teniendo en cuenta (7.6) y (7.7):

$$\begin{aligned} H(i,i) &= \alpha_i + 2\beta_1 \cos(ka) \\ H(i,i\pm 1) &= \beta_2 \end{aligned} \quad \begin{aligned} i &= 1, N \\ -\pi/a &\leq k \leq \pi/a \end{aligned} \quad (7.8)$$

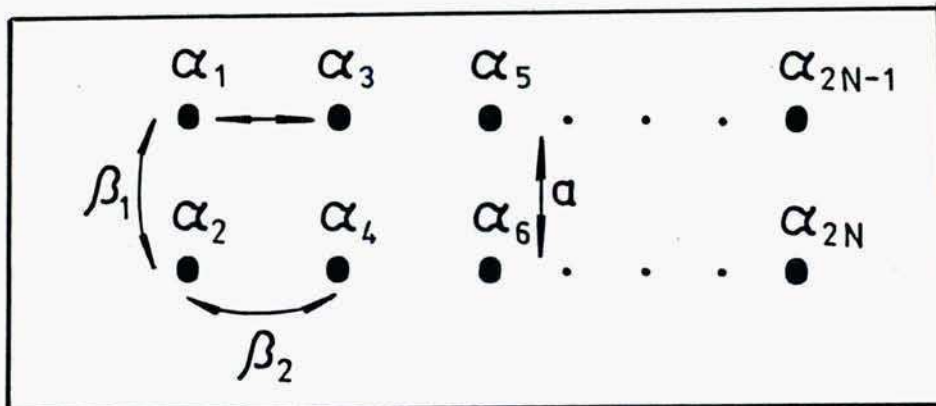


FIGURA VII.3: Celda unidad del modelo en antifase. Modelo (ii)

Para el modelo (ii) la celda unidad es la que aparece en la figura VII.3. Los elementos de la matriz del Hamiltoniano para cada valor de k serán:

$$H(i,i) = \alpha_0 + (-1)^i \Delta \cos[Q((i+R)/2)]$$

$R=0$ si i es par

$R=1$ si i es impar

$$H(i\pm 1,i) = \beta_1(1 + e^{\pm i2ka}) \quad \text{si } i \text{ es par}$$

$$H(i\pm 1,i) = 0. \quad \text{si } i \text{ es impar}$$

$$H(i\pm 2,i) = \beta_2 \quad \text{para todo } i$$

$$-\pi/2a < k < \pi/2a$$

(7.9)

El ancho de banda de Lifshitz de los modelos bidimensionales (i) e (ii), será igual a $4\beta_1 + 4\beta_2 + 2V_0 = W$. Para un dado valor de k la densidad de estados del modelo (i) es la del incommensurado unidimensional, para el mismo valor de la incommensuración Q , centrada en $2\beta_1 \cos(ka)$.

Supongamos que un dado gap en la densidad de estados unidimensional tiene un ancho G . Dado que la densidad de estados del sistema bidimensional se obtiene superponiendo las densidades de estado unidimensionales correspondientes a valores de k que van desde $-\pi/a$ hasta π/a , de tal manera que los centros de las sucesivas densidades de estado barren el eje de las energías de $-2\beta_1$ a $+2\beta_1$, el gap de ancho G mencionado seguirá existiendo sólo si

$$\beta_1 < G/4$$

(7.10)

Esto es coherente con el hecho de que persistirán tantos más gaps, cuanto más pequeño sea el valor de β_1 con respecto a β_2 , o sea que para $\beta_1 \rightarrow 0$ se recuperará el problema unidimensional con modulación coseno. Cuanto mayor es la interacción entre cadenas más se borran los gaps del problema unidimensional.

VII.3 Método de cálculo de la densidad de estados

Para calcular la densidad de estados de los modelos bidimensionales (i) y (ii) hemos tenido en cuenta que la matriz del

Hamiltoniano de estos sistemas, en el espacio k , es a lo sumo pentadiagonal, lo que significa que se puede obtener la densidad de estados de los mismos aplicando para cada valor de k el método de Dean, ya usado en los capítulos que preceden. Finalmente para obtener $n(E)$ se integra sobre el espacio k .

Para calcular la densidad de estados del modelo (iii), debido a la falta de periodicidad en ambas direcciones, hemos calculado $n(E)$ diagonalizando directamente la matriz del Hamiltoniano en el espacio directo. Lógicamente el número de átomos es muy distinto y la información también.

Volviendo a los modelos (i) e (ii), tenemos para la densidad de estados:

$$n(E) = \sum_k n(E)_k g(k) / (IR * N) \quad (7.11)$$

En esta expresión IR es el número de valores de k usados, N es el número de átomos que hemos hecho entrar en la celda unidad y $g(k)$ es el peso de cada k .

Con el objeto de evaluar la cantidad de valores sobre el eje k a usar en el cálculo de $n(E)$, hemos calculado como paso preliminar, la densidad de estados de la red cuadrada. La red cuadrada se obtiene haciendo $\beta_1 = \beta_2 = 1$ y $\alpha_0 = \Delta\alpha = 0$. en (7.8) ó en (7.9). En el primer caso la celda unidad consta de una ristra y en el segundo de dos ristras de átomos.

Para calcular la densidad de estados de la red cuadrada usando la celda unidad de dos ristras, hemos tridiagonalizado cada matriz pentadiagonal $H(k)$, siendo el paso subsiguiente la obtención de $n(E)$ por medio del método de Dean⁽³⁸⁾ y la aplicación de (7.11). Los valores de k se escogieron equidistantes entre sí, barriendo el eje k en el intervalo $[-\pi/2, 0]$, siendo $a=1$ y $g(k)=2$ para todo k menos para $k=0$ y $g(0)=1$.

Tomando $N=100$ y 20 valores de k en el intervalo mencionado se obtienen para el histograma los valores que aparecen en la tabla VII.1. Los resultados se normalizan a 1 al dividir por N cada uno de los valores que ahí aparecen.

6.7	5.3	4.45	3.5	3.7	3.45	3.1	2.9	2.8	2.65
2.6	2.6	2.4	2.25	2.1					

TABLA VII.1: Valores del histograma de $n(E)$ para la red cuadrada. $\Delta E = 0.259$. Celda unidad de dos ristras. EL histograma comienza en $E=0$.

Estos resultados corresponden a haber tomado una cadena abierta. Tomando 40 valores de k los resultados no varían de manera notoria y son además similares a los obtenidos tomando 100 valores para k en el intervalo $[-\pi, 0]$ y celda unidad de una ristra.

Los valores obtenidos para la $n(E)$ de la red cuadrada usando celda unidad de una ristra y 20 y 100 valores para k , respectivamente, aparecen en la tabla VII.2.

6.7	5.3	4.15	3.75	3.75	3.35	2.9	3.3	2.3	3.35
1.95	2.95	1.75	2.4	2.1					
6.8	5.16	4.23	3.95	3.49	3.39	3.08	2.94	2.78	2.63
2.49	2.45	2.31	2.2	2.1					

TABLA VII.2: Histogramas de $n(E)$ para la red cuadrada, tomando celda unidad de una ristra, para 20 y 100 valores de k entre $-\pi$ y 0., respectivamente. Los histogramas comienzan en $E=0$. $\Delta E = 0.259$

VII.4 Cálculos y resultados para los distintos modelos

Hemos calculado $n(E)$ usando, para cada valor de k , cadenas abiertas de 100 átomos (2 ristras de 50 átomos cada una en el caso del modelo (ii) y cadenas de 100 átomos cada una para el modelo (i)). Hemos barrido el espacio k tomando en cada caso 30 valores para k_y en el intervalo $[-\pi/2, 0]$ y $[-\pi, 0]$ respectivamente, basándonos en la precisión obtenida para la red cuadrada.

Con el objeto de chequear lo dicho en VII.2 hemos calculado $n(E)$ para ambos modelos tomando $Q/2\pi = (\sqrt{13}-3)/2$, $\beta_1 = .1$ y $.5$ y $\beta_2 = \Delta\alpha = 1$. ($\alpha_0 = 0$). Ver figura VII.4. Mostramos los resultados obtenidos para estos valores de los parámetros pues el efecto más interesante de la segunda dimensión es que ya para una interacción muy pequeña entre cadenas $n(E)$ para el modelo en fase pierde el carácter unidimensional y desaparece la estructura de gaps. Para $\beta_1 = .1$ la forma de la densidad de estados está, ya, considerablemente cambiada si uno la compara con la correspondiente al problema unidimensional (fig II.3) y la estructura de minigaps ya ha desaparecido. En la misma figura se puede observar que el modelo en antifase presenta dos gaps para un intervalo grande de valores de β_1 , aunque ya para $\beta_1 = .1$ la forma de las bandas laterales se ha modificado totalmente, desapareciendo el carácter unidimensional del sistema dado por la singularidad de van Hove en el borde de la banda. La banda central preserva el carácter unidimensional, indicando que existe una anisotropía en el sistema, dada por la unidimensionalidad de la inconmensuración; contrastando con esto, la forma de las bandas laterales delata la bidimensionalidad del sistema.

Para comparar los resultados obtenidos para el modelo (i) con lo dicho al finalizar VII.2, notemos que la densidad de estados del inconmensurado unidimensional (fig II.3) con $\Delta\alpha = \beta_2 = 1$, tiene un gap de ancho igual a $.914\beta_2$. Entonces, según (7.10), para $\beta_1 = .1$, o sea $\beta_1 \ll W/4$, $n(E)$ debe presentar

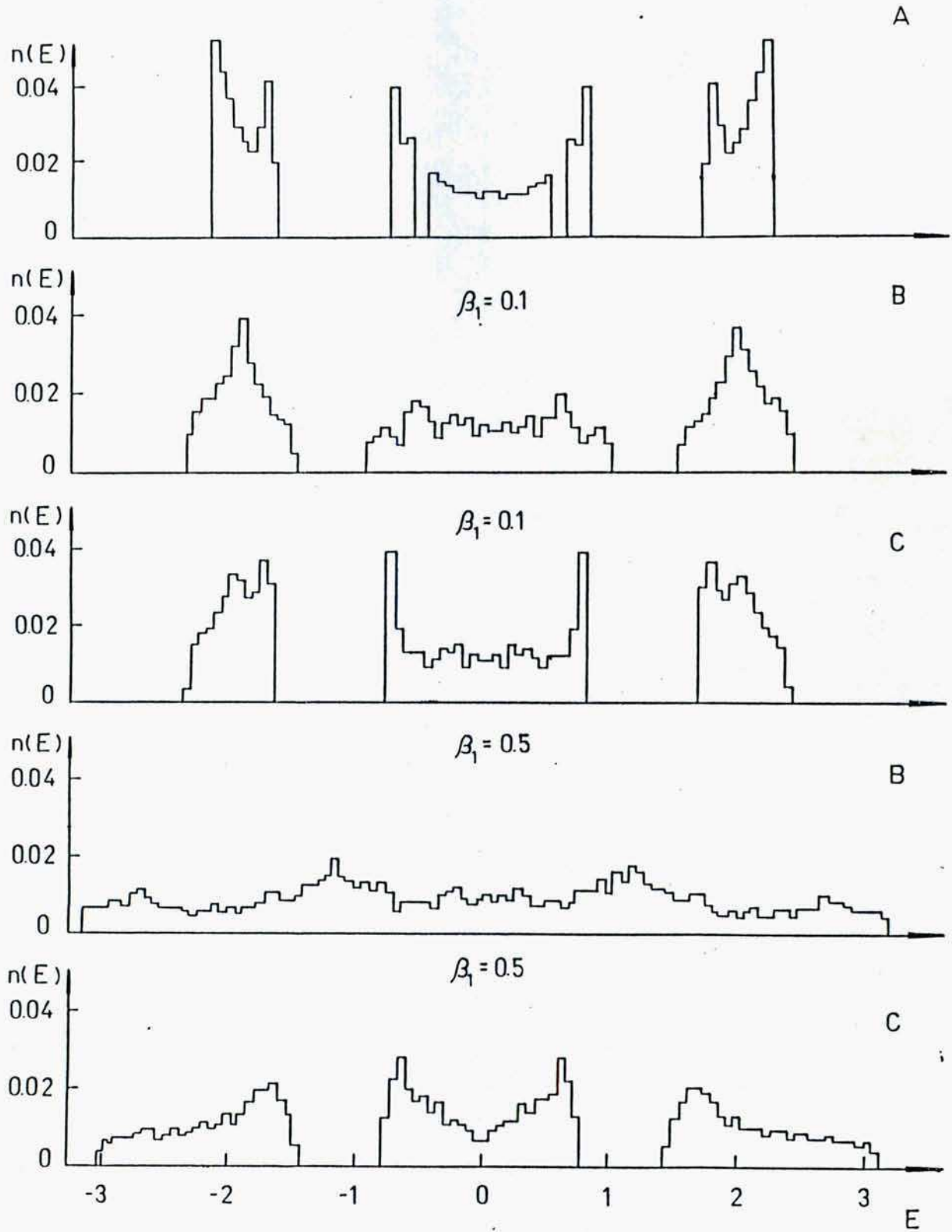


FIGURA VII.4: $n(E)$ para: (A) cadena unidimensional con modulación tipo coseno (B) modelo bidimensional en fase, (C) modelo bidimensional en antifase. $\Delta\alpha=\beta_2=1$. y $Q/2\pi=(\sqrt{13}-3)/2$.

dos gaps y efectivamente los tiene y para $\beta_1 \gg W/4$ no debe existir ningún gap, siendo ésto lo que efectivamente ocurre para $\beta_1 = .5$

Hemos calculado $n(E)$ para el modelo (ii), para dos valores de $Q/2\pi$, $(\sqrt{13} - 3)/2$ y $\sqrt{2} - 1$ y varios valores de las relaciones β_1/β_2 y $\Delta\alpha/\beta_2$ en cada caso, se pueden resumir los resultados obtenidos de la manera que sigue:

A $\Delta\alpha$ constante, a medida que aumenta β_2 versus β_1 se va recuperando el problema inconmensurado unidimensional. Si β_1 es muy grande con respecto a β_2 y $\Delta\alpha$ es comparable a β_1 se obtiene una densidad de estados que tiende a la del sistema unidimensional conmensurado con un átomo por celda unidad. Para β_1 comparable con β_2 y $\Delta\alpha$ pequeño con respecto a β_1 y β_2 se obtiene la red cuadrada y a medida que aumenta el valor de $\Delta\alpha$ se van abriendo los gaps originados en la inconmensuración. Volviendo a los casos en los cuales $\beta_2 \ll \beta_1$, pero $\beta_2 \neq 0$, dado que la distribución del coseno diverge en ± 1 y es muy chica en cero, la densidad de estados es insignificante en $E = 0$ y alrededores y tiene su mayor peso en $\pm \Delta\alpha$. Ver figura VII.5.

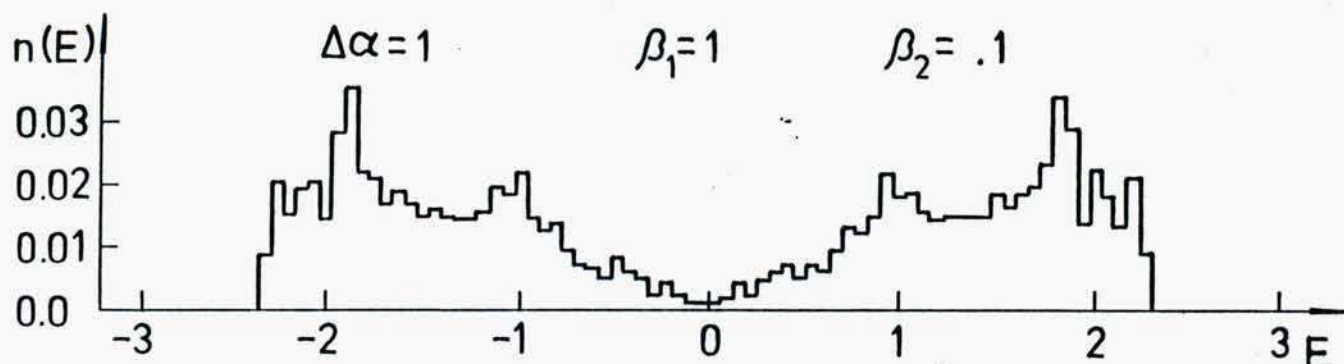


FIGURA VII.5: Densidad de estados para el modelo en anti-fase. $\Delta\alpha=1$, $\beta_1=1$, $\beta_2=.1$ $Q/2\pi=(\sqrt{13}-3)/2$.

Para calcular la densidad de estados del modelo (iii), incommensuración según dos direcciones, hemos diagonalizado directamente la matriz del Hamiltoniano aproximando las respectivas incommensuraciones Q_1 y Q_2 por $Q_1/2\pi = n_1/N$ y $Q_2/2\pi = n_2/M$. Tomando sistemas de $N \times M$ átomos, los elementos de la matriz H son:

$$H(i,i) = \Delta \alpha \cos(2\pi(n_1/N)ai_1 + 2\pi(n_2/M)ai_2)$$

$$i_1 = i - [i/N] \cdot N \quad \text{si } i/N \text{ no es entero, sino } i_1 = N$$

$$i_2 = [i/N] + 1 \quad \text{si } i/N \text{ no es entero, sino } i_2 = [i/N]$$

$$H((j-1) \cdot N + i, j \cdot N + i) = \beta_1 \quad \begin{matrix} j=1, M-1 \\ i=1, N \end{matrix}$$

$$H(N \cdot (j-1) + i, (j-1) \cdot N + i + 1) = \beta_2 \quad \begin{matrix} j=1, N \\ i=1, n-1 \end{matrix} \quad (7.12)$$

Dado que los tiempos de cálculo son muy altos hemos aproximado haciendo $Q_1/2\pi = 3/10$ ó $5/12$ y lo mismo para $Q_2/2\pi$. Hemos tomado contornos abiertos y sólo 20 subdivisiones en la escala de las energías debido al escaso número de estados que tiene nuestro sistema.

Para controlar si se pueden estimar los resultados con tan pocos átomos y con Q aproximado por un racional de denominador pequeño comparamos las densidades de estado de los siguientes sistemas:

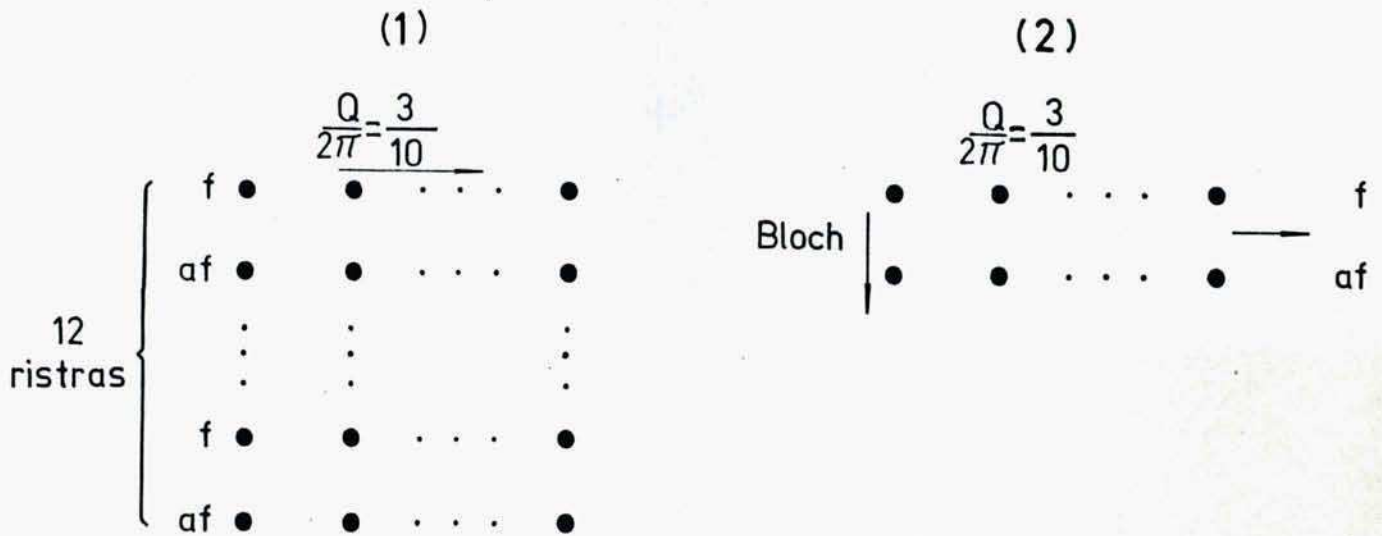


FIGURA VII.6: (1) Red formada por 12 ristas de átomos en antifase, modulada según x con $Q/2\pi=3/10$. f: fase, af: antifase. (2) Sistema en antifase, modulado según x con $Q/2\pi=3/10$. Según y el sistema es periódico.

que aparecen en la figura VII.7. Se observa que la $n(E)$ obtenida para (1) (que es una aproximación de (2)) es muy buena comparada con la que se obtiene por Bloch, de lo cual se desprende que las obtenidas en la figura VII.8 para $Q_1/2\pi=Q_2/2\pi=3/10$, $Q_1/2\pi=3/10$ y $Q_2/2\pi=5/12$ y $Q_1/2\pi=Q_2/2\pi=5/12$ estarán bastante bien logradas. Se observa que la introducción de la segunda dimensión inconmensurada provoca la desaparición del "pozo" que tiene en $E=0$. el sistema de la fig. VII.7 .

Comparando, ahora, los sistemas que aparecen en la figura VII.9, se observa que el ancho de banda, dentro de la aproximación usada es el mismo para (1) y (2), ver figuras VII.7(1) y VII.8(1). Para los parámetros usados, $\Delta\alpha=3.$, $\beta_1=\beta_2=1.$, (1) presenta dos gaps simétricos, (2) no presenta gaps, aunque sí se notan mínimos en aproximadamente el mismo lugar que los de (1). Además (1) presenta una depre-

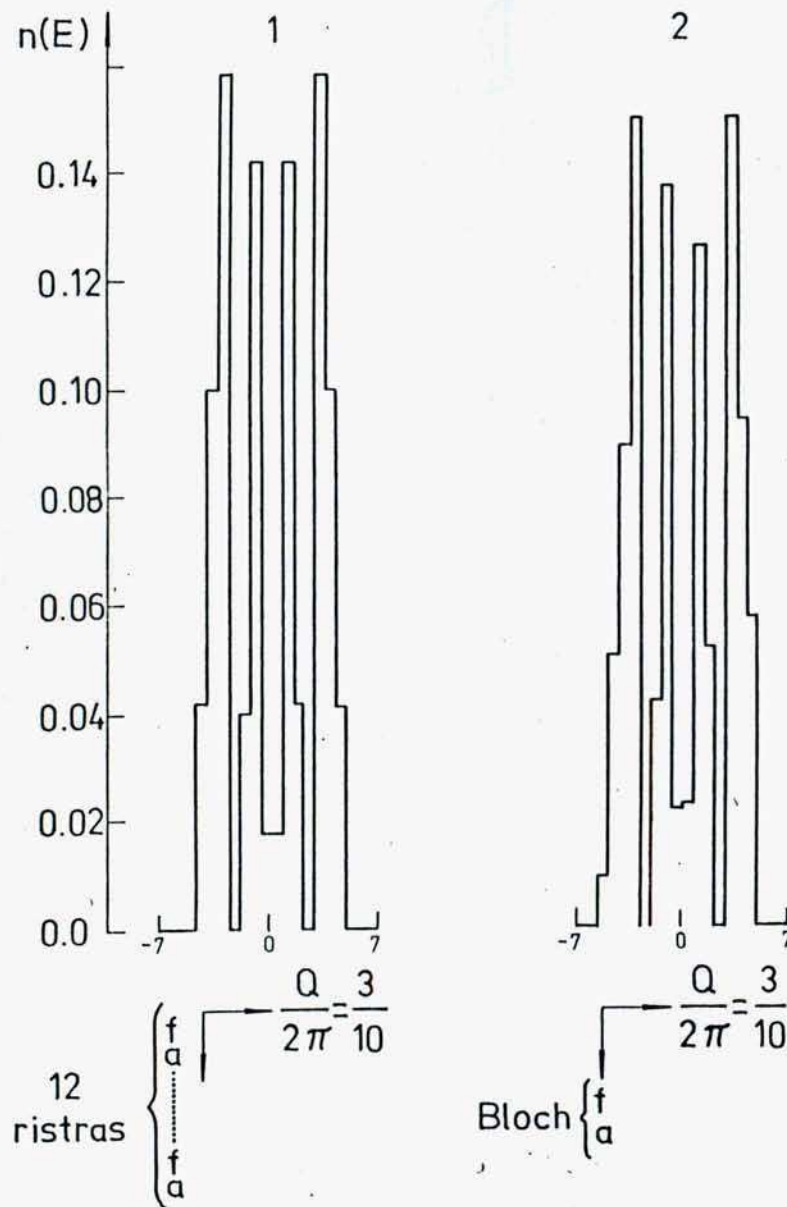


FIGURA VII.7: $n(E)$ para las redes que aparecen en la figura VII.6

$$\Delta\alpha=3, \quad \beta_1 = \beta_2 = 1.$$

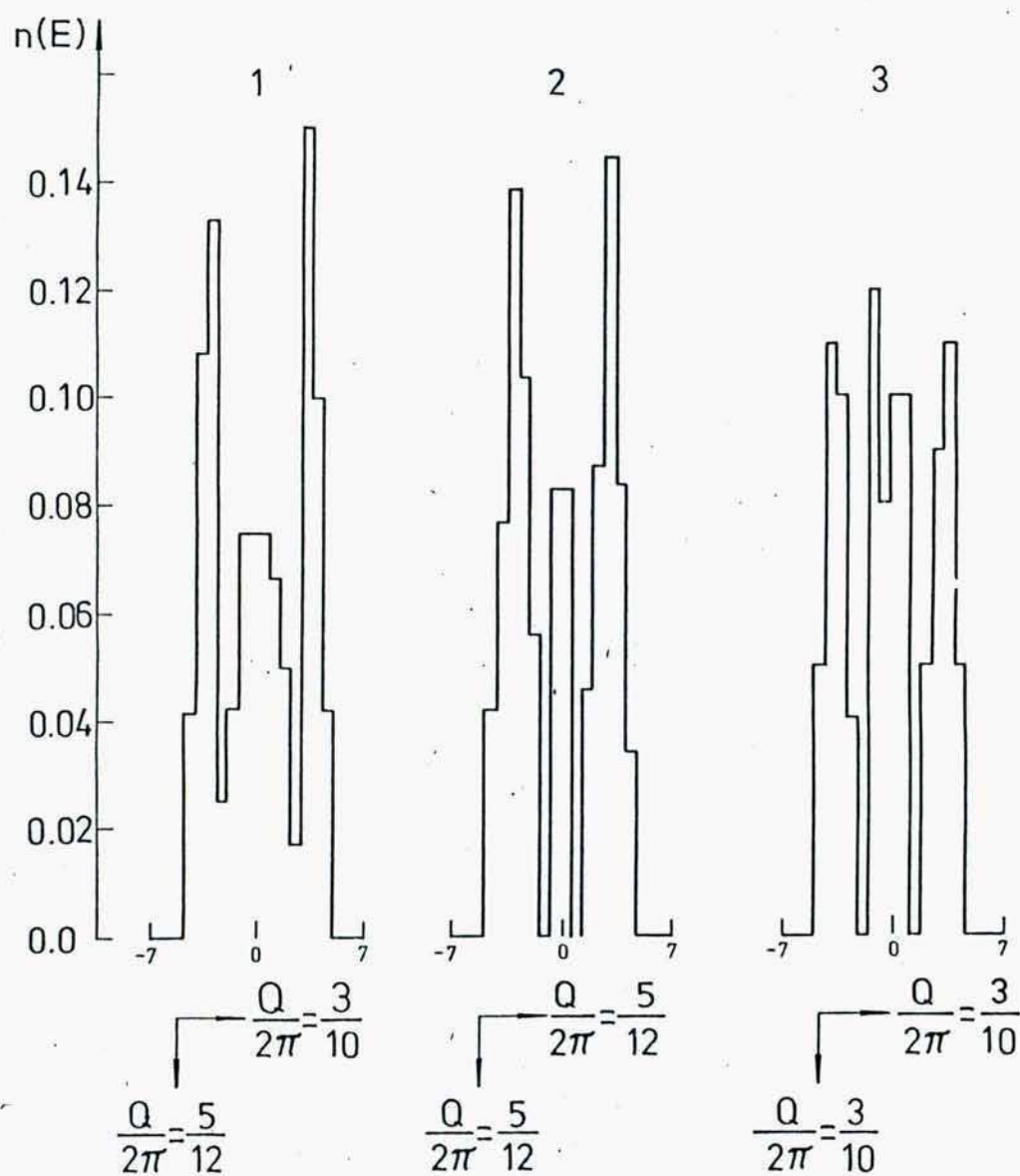


FIGURA VII.8: $n(E)$ para sistemas bidimensionales incommensurados según dos direcciones. $\Delta\alpha=3., \beta_1=\beta_2=1$

si3n pronunciada en $E=0$ y alrededores, situaci3n que no se repite en (2). Si calcul3semos con m3s precisi3n, ver3amos que esa depresi3n, que aparece en (1) es un gap que se va haciendo cada vez m3s peque1o al aumentar el n1mero de ristras del sistema. De la forma de $n(E)$ se desprende que (1) presenta m3s caracter3sticas unidimensionales que (2).

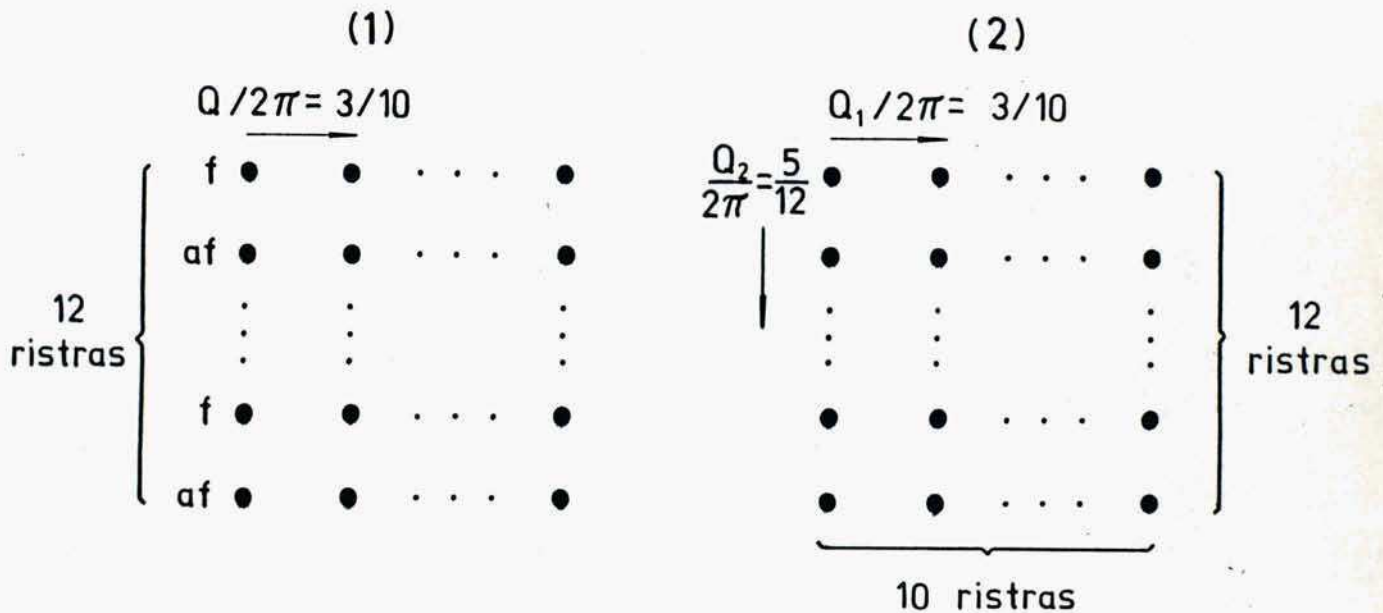


FIGURA VII.9: (1) Sistema en antifase (f:fase, af=antifase), formado por 12 ristras seg1n "y" y 10 seg1n "x". La modulaci3n seg1n "x" viene dada por $Q/2\pi:3/10$.

$$\alpha_i = (-1)^{i+1} \Delta \alpha \cos(Q a_i)$$

(2) Sistema inconmensurado seg1n dos direcciones. $Q_1/2\pi=3/10$, $Q_2/2\pi=5/12$.

$$\alpha_i = \Delta \alpha \cos(Q_1 a_i + Q_2 a_j)$$

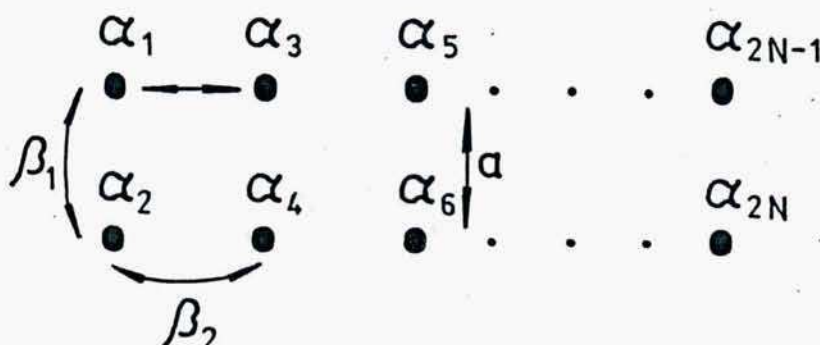
En ambos casos $\beta_1 = \beta_2 = 1$.

En cuanto al n1mero de estados que hay en las bandas de la densidad de estados, tanto en el modelo fase como en el antifase se cumple la regla expuesta en el Cap1tulo II. Nos estamos refiriendo a las bandas y no a las minibandas, dado que las 1ltimas desaparecen en parte o totalmente dependiendo del valor de los par3metros de interacci3n en los modelos bidimensionales con inconmensuraci3n seg1n una direcci3n.

El número de estados en las bandas de los sistemas con incommensuración según dos direcciones es consistente con lo hallado en los problemas anteriores, si $Q_1=Q_2$. Cuando $Q_1 \neq Q_2$, el número de estados que correspondería a la banda central está más cercano a lo que poseería el incommensurado unidimensional cuya primera aproximación viene dada por $Q/2\pi=3/10$ que a la correspondiente a $Q/2\pi=5/12$. Parece como si $Q/2\pi=3/10$ imprimiese con más fuerza sus características asociadas al sistema bidimensional que $Q/2\pi=5/12$. Una de las características relevantes de los sistemas incommensurados sería, entonces el número de estados de la banda central con respecto al número de estados de las bandas laterales, independientemente de la dimensionalidad del sistema.

VII.5 Densidad de estados de una cinta

Hemos calculado la densidad de estados de un sistema cuasi-unidimensional parecido al modelo en anti fase bidimensional, o sea, del sistema:



para ver los efectos de la segunda dimensión. Los α_i tienen la misma forma que en (7.9) y $Q/2\pi=33/109$ y $29/70$. Ver figura VII.10. Para el cálculo hemos diagonalizado cadenas de 218 y 140 átomos respectivamente, y por lo tanto sólo podemos garantizar la existencia de los gaps más grandes.

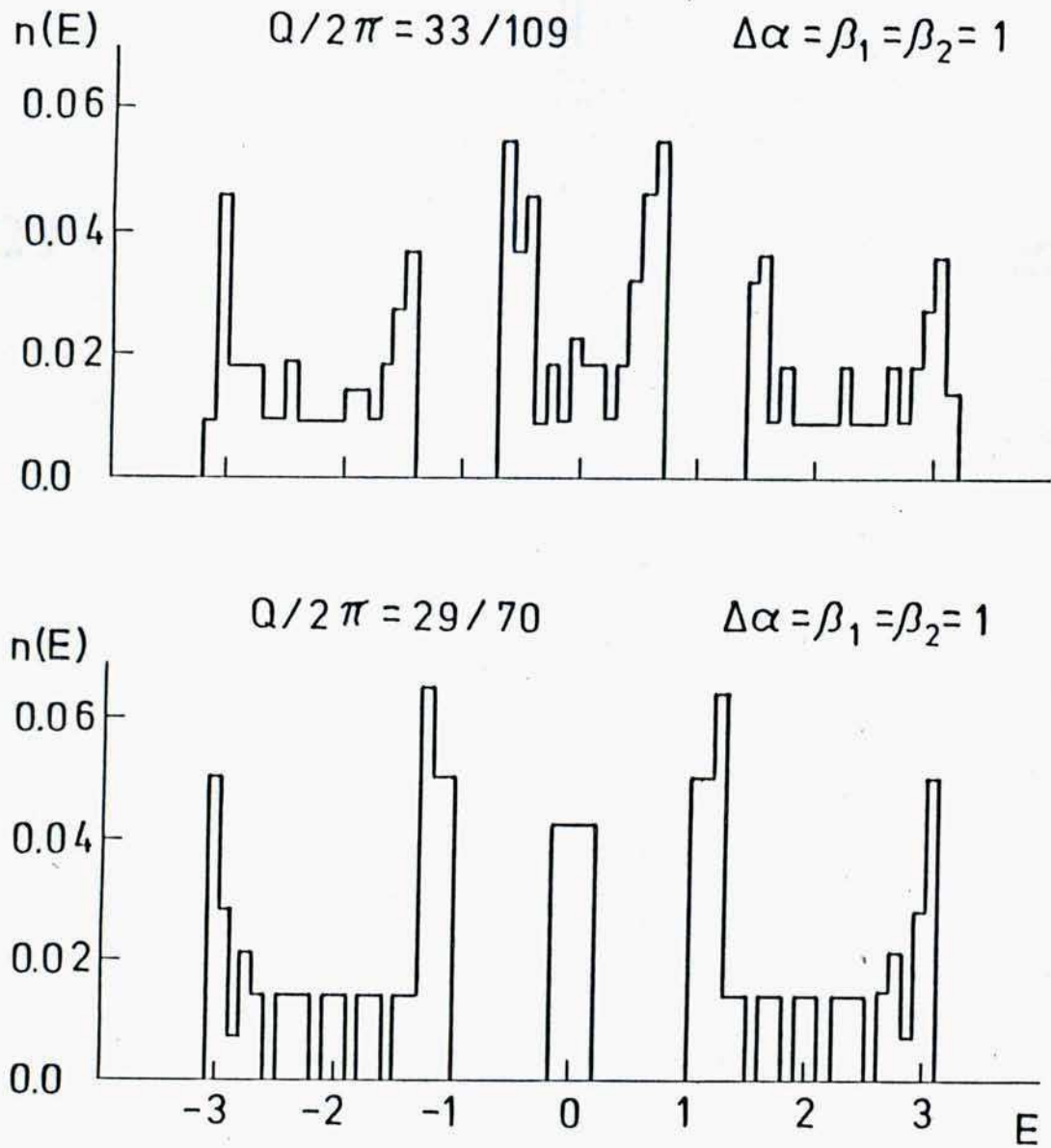


FIGURA VII.10: $n(E)$ para una cinta formada por dos ristras en antifase para dos valores distintos de $Q/2\pi$

Se observa comparando $n(E)_{\text{cinta}}, \Delta\alpha=\beta_1=\beta_2=1$. y $Q/2\pi=33/109$, con $n(E)_{\text{anti-fase}}, \Delta\alpha=\beta_1=\beta_2=1$ y $Q/2\pi=(\sqrt{13}-3)/2$, fig VII.4, que los gaps que aparecen en $n(E)_{\text{cinta}}$ han desaparecido en el problema bidimensional. Las bandas del sistema cinta tienen caracter muy unidimensional, lo cual indica que el problema se asemeja mucho al unidimensional inconmensurado. Lo propio sucede con $Q/2\pi=29/70$. En cuanto al número de estados en cada banda, se repite la misma regla del problema unidimensional.

VII.6 Densidad de estados de dos ejemplos tridimensionales

Hemos calculado $n(E)$ para un sistema que es inconmensurado según la dirección "z" y periódico según las otras dos. Elegimos como modelo una extensión del modelo en antifase bidimensional, de tal manera que cadenas primeras vecinas estén en antifase con respecto a las otras. La celda unidad aparece en la figura VII.11.

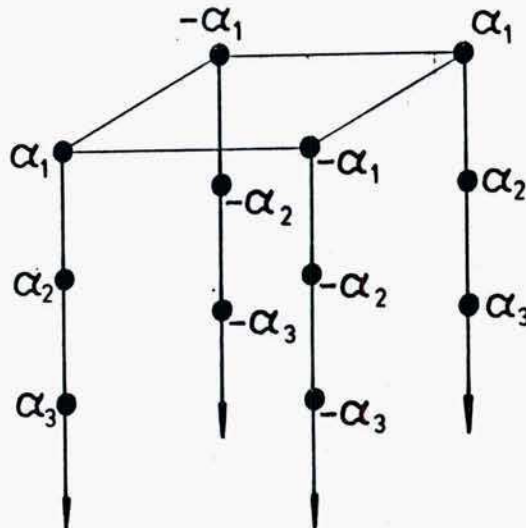


FIGURA VII.11: Celda unidad del modelo en antifase tridimensional

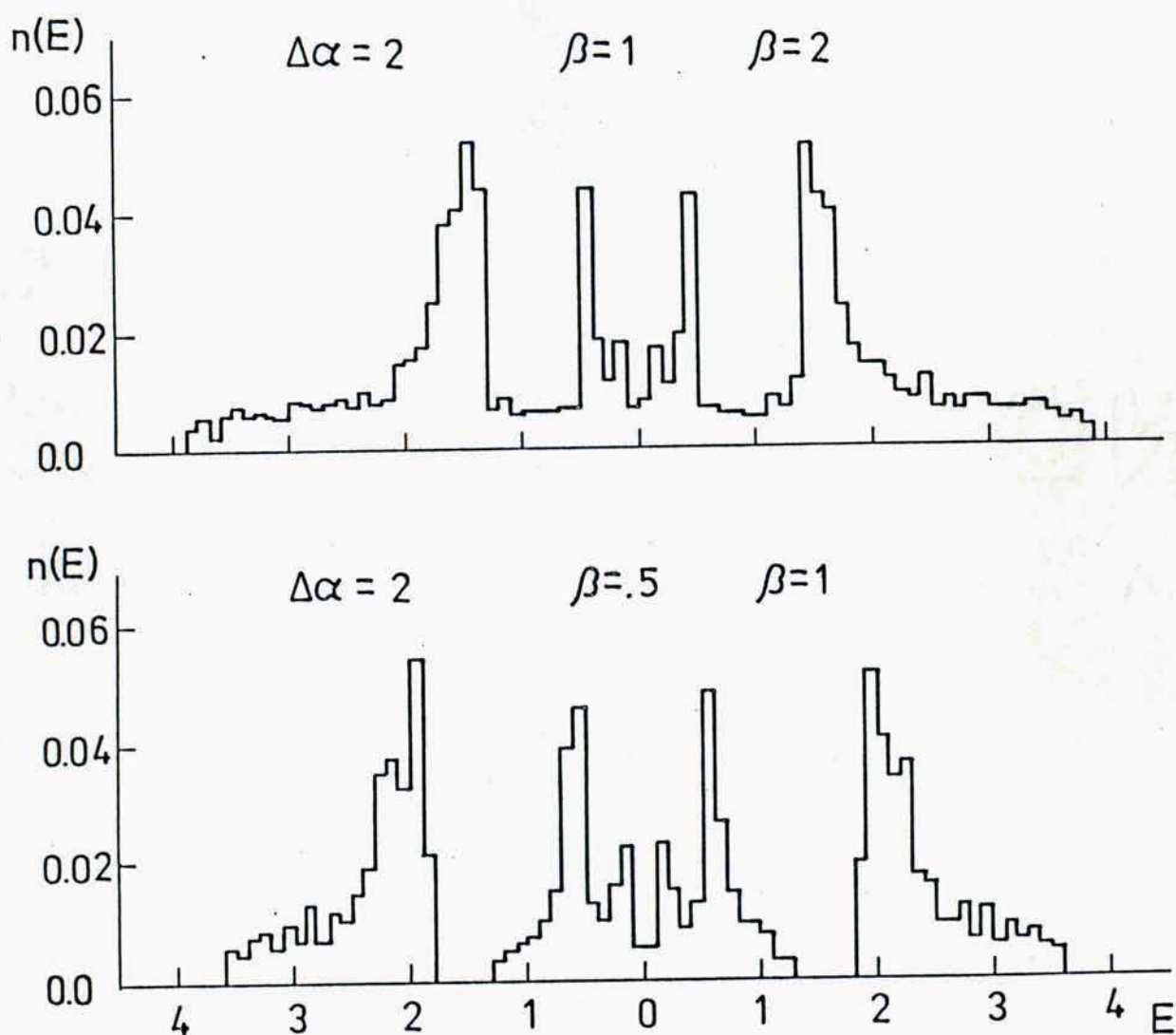


FIGURA VII.12: $n(E)$ para dos ejemplos tridimensionales, inconmensurados según una sola dirección. La celda unidad correspondiente es la que aparece en la figura VII.11. En ambos casos $Q/2\pi = 10/33$.

Para los α_i hemos elegido nuevamente la modulación cose-
no. Para ahorrar tiempo de CPU hemos corrido el programa sola-
mente para los siguientes valores de los parámetros:
 $Q/2\pi=10/33$, $\beta_1=\beta_2=1.$, $\Delta\alpha=2.$ y $\beta_1=.5$, $\beta_2=1.$, $\Delta\alpha=2.$

En la figura VII.12 aparecen los histogramas de $n(E)$. El
primer ejemplo no presenta gaps (se han borrado los del problema
bidimensional), por otro lado el histograma presenta mucha es-
tructura. En el segundo ejemplo aparecen dos gaps. Nótese que
la banda central presenta un carácter mucho más unidimensional
que las laterales, aunque menos que el caracter unidimensional
presentado por el problema equivalente en dos dimensiones.
Nuevamente es la banda central la que delata la anisotropía de
la inconmensuración.

La distribución de estados en las bandas sigue nuevamente
la misma regla que el problema unidimensional.

VII.7 Comparación de la densidad de estados del grafito y de la red cuadrada, inconmensurados en una dirección

Con el objeto de estudiar la dependencia de las propiedades
de la densidad de estados de los sistemas inconmensurados con la
geometría del sistema, hemos comparado las densidades de estado
de la red cuadrada con inconmensuración según una dirección (en
el caso particular $\beta_1=\beta_2$ del modelo en fase) con la de la
red de grafito, también con inconmensuración según una direc-
ción.

Para la red de grafito hemos elegido la siguiente celda
unidad:



Los elementos de matriz en el espacio k son los siguientes:

$$\begin{aligned} H(i, i+1) &= \beta + \beta e^{-i2k} & i=1, 4, 7, 10, \dots \\ H(i, i+1) &= \beta & i=2, 5, 8, 11, \dots \\ H(i, i+1) &= \beta + \beta e^{i2k} & i=3, 6, 9, 12, \dots \\ H(i, i) &= \alpha_0 + \Delta \alpha \cos(2\pi Q b(i) + h) \end{aligned} \quad (7.13)$$

En (7.13) $b(1)=0.$, $b(2)=b(1) + (\cos 30/\cos 60)a$, $b(3)=b(2) + a$ y en general $b(2i)=b(2i-1) + (\cos 30/\cos 60)a$, $b(2i+1)=b(2i) + a$.

La densidad de estados del grafito se puede calcular como superposición de densidades de estado unidimensionales, cuyos elementos de matriz son los que hemos presentado. Los cálculos han sido hechos, en todos los casos, tomando 30 valores de k y 100 átomos por cadena. Hemos considerado $\alpha_0=h=0.$ y $Q/2\pi=(\sqrt{13}-3)/2$. En la figura VII.13A y VII.13B mostramos los resultados obtenidos para estas dos redes para distintos valores de la amplitud de modulación $\Delta\alpha$. Vemos que en el caso del grafito, a medida que incrementamos el valor de $\Delta\alpha$, el valor de la densidad de estados tiende a disminuir en el centro de la banda, lo que significa que el sistema se comporta cada vez más como unidimensional debido a la anisotropía creciente de la inconmensuración.

En la tabla VII.3 mostramos el porcentaje de estados que están concentrados en el 33% central de la banda para diferentes valores de $\Delta\alpha$, tanto para grafito como para la red cuadrada. De la tabla se desprende que en el caso de la red cuadrada el número de estados en el centro de la banda no decrece tan abruptamente como en el caso del grafito, pero existe de todos modos una tendencia a la unidimensionalidad. Que esta tendencia no sea tan importante como en el otro caso, puede comprenderse teniendo en cuenta que la densidad de estados de la red de grafito (sin inconmensuración) se parece más a la de la cadena unidimensional que la de la red cuadrada, que tiene su singularidad en el centro de la banda.

A

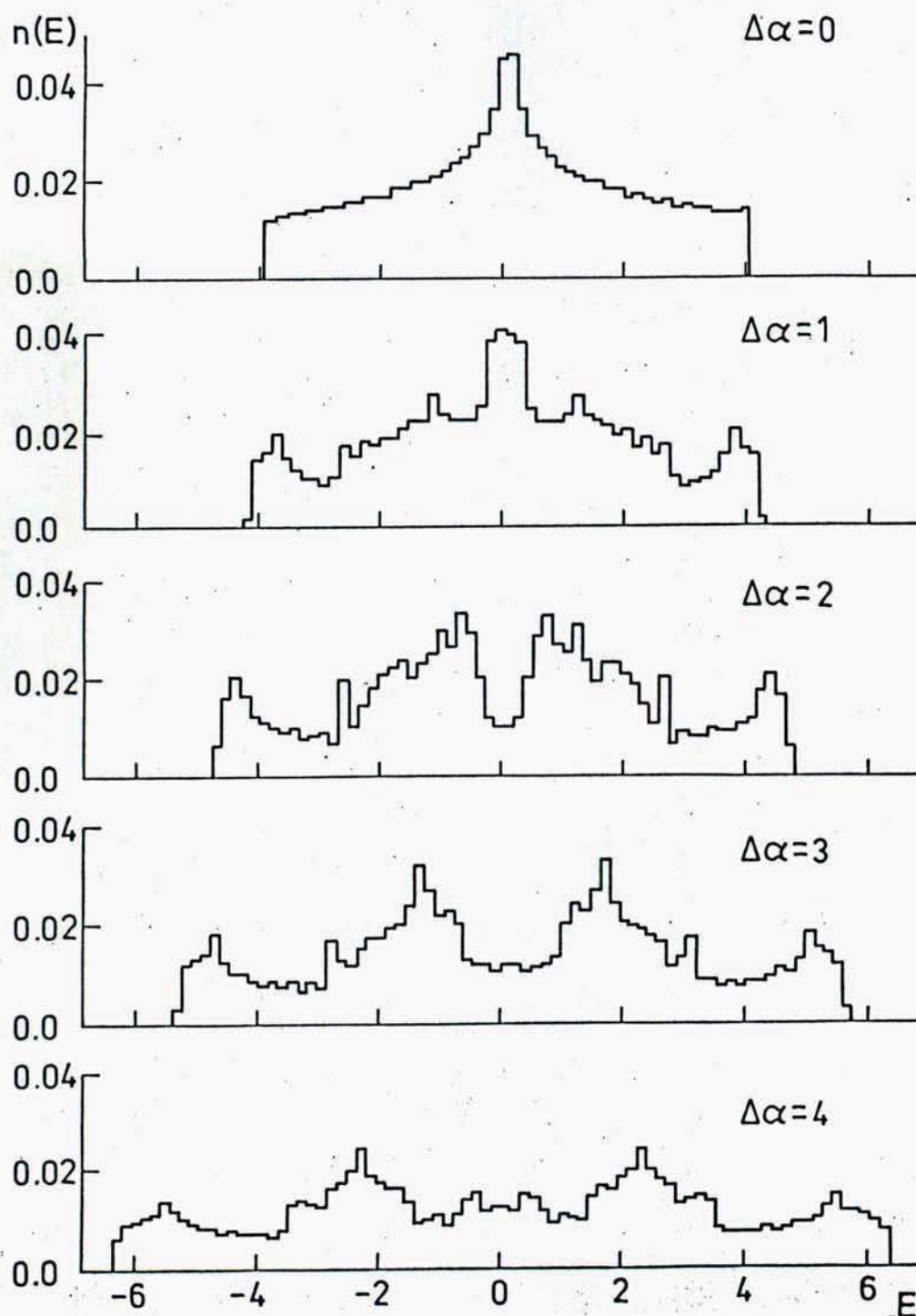


FIGURA VII.13A: $n(E)$ para la red cuadrada incommensurada según una dirección para distintos valores de $\Delta\alpha$. En todos los casos $Q/2\pi = (\sqrt{13} - 3)/2$ y $\beta_1 = \beta_2 = 1$.

B

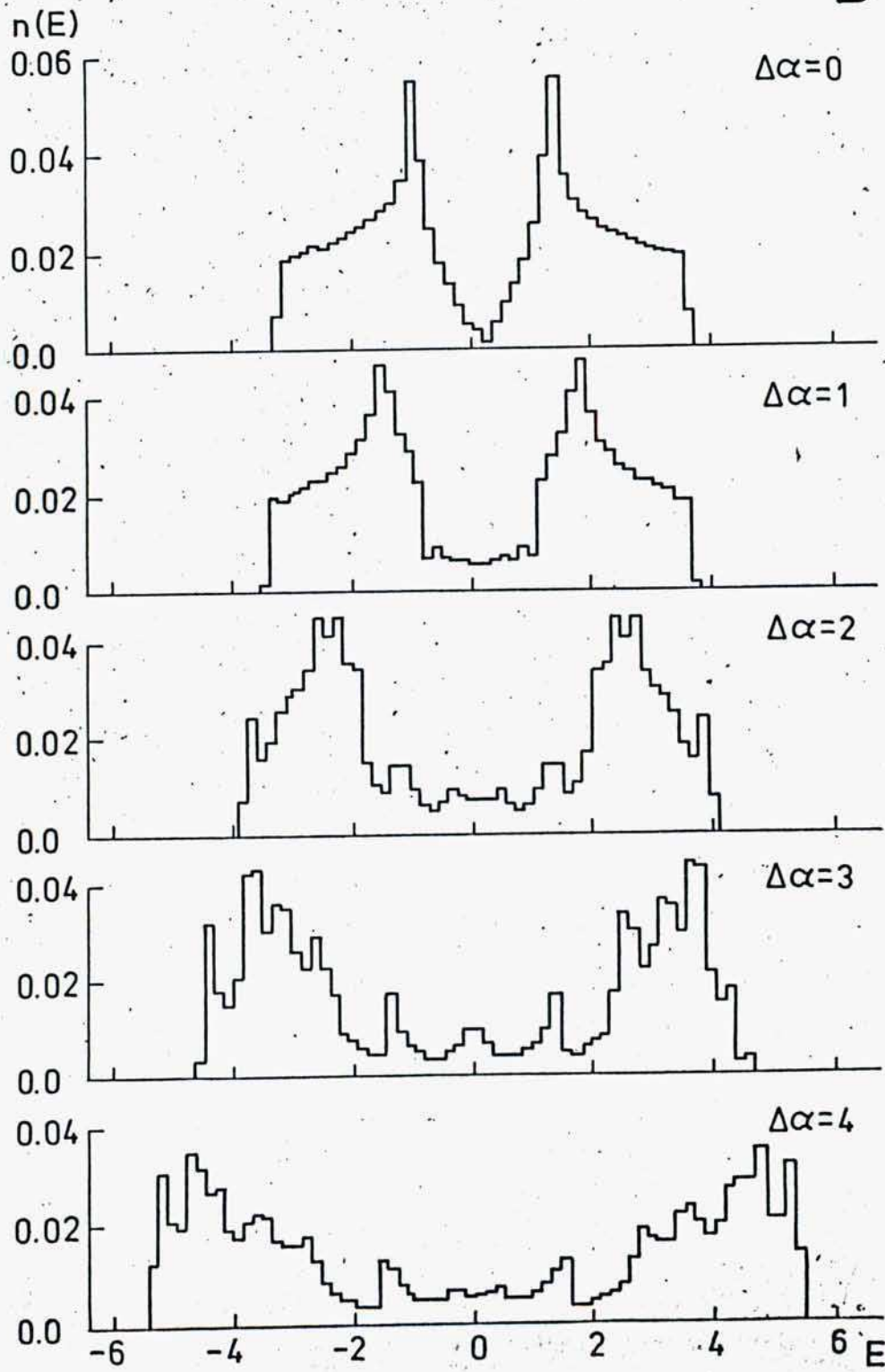


FIGURA VII.13B: Idem figura VII.13A pero para la red de grafito incommensurada según una dirección.

$\Delta\alpha$	Porcentaje del número total de estados en el 33% central de la banda grafito red cuadrada	
0	33	50
1	19.5	47.5
2	14.5	45.5
3	15	43.2
4	16	38.4

VII.8 Conclusiones

Hemos comprobado que para calcular densidades de estado de sistemas bidimensionales con inconmensuración tan sólo según una dirección, el método de Dean sigue siendo sumamente útil y de bajo costo comparado con la diagonalización directa de matrices.

En cuanto a las características de las densidades de estado de los modelos presentados, vemos que una pequeña interacción entre cadenas ($\beta_1=.5$) destruye las características del inconmensurado unidimensional en el caso del modelo en fase. Se destruyen los gaps y minigaps de mayor tamaño, aunque es muy probable que el sistema presente minigaps muy angostos, que son imposibles de detectar con nuestro cálculo.

El modelo en antifase conserva, para valores más grandes de los parámetros, una estructura con gaps, asemejándose más la densidad de estados de la cinta en antifase, que la densidad de estados del sistema bidimensional en fase a la densidad de estados del problema unidimensional.

De todos los modelos para los cuales hemos calculado densidades de estado, concluimos que el rasgo más relevante de los sistemas inconmensurados es el número de estados que se encuentran en la banda central, obedeciendo este número la misma regla

en todos los casos, la que hemos enunciado al tratar los modelos unidimensionales. En el caso de dos inconmensuraciones distintas no se puede usar el método de Dean y se debe recurrir a la diagonalización directa, lo cual lleva lógicamente a la falta de precisión en los cálculos y no nos permite ser concluyentes en cuanto a la regla que obedece la distribución de estados.

Hemos observado que la densidad de estados en la parte central de la banda presenta características más unidimensionales que en los extremos de la misma en todos los casos en los cuales se tiene inconmensuración según una dirección, delatando de esta forma el centro de la banda el carácter anisotrópico del sistema. Esto se traducirá, como veremos en el capítulo siguiente, en un comportamiento muy particular de la localización en los modelos en antifase.

La geometría subyacente a la inconmensuración tiene su importancia, pues tal como hemos expuesto en VII.7, la densidad de estados del grafito inconmensurado se parece más a la de la cadena unidimensional que la de la red cuadrada. Es de esperar, entonces, que estos dos sistemas presenten características distintas en propiedades físicas tales como la localización.

CAPITULO VIII

Localización en los sistemas inconmensurados bidimensionales

VIII.1 Introducción

Estudiar las propiedades de localización de sistemas que tienen más de una dimensión no es sencillo. Por un lado son muy pocos los sistemas que se pueden resolver analíticamente; inclusive en una dimensión hay pocos ejemplos que permiten una resolución analítica^(32,33) y por otra parte las soluciones numéricas tienen sus límites impuestos por el tiempo de computación involucrado en los cálculos y la precisión de los mismos. Además, nos interesa extrapolar los resultados obtenidos para muestras de tamaño finito a sistemas de tamaño infinito.

En los últimos tiempos varios autores se han dedicado a calcular longitudes de localización para sistemas desordenados esencialmente infinitos según una dimensión y de sección finita perpendicular a esa dirección^(58,62), estudiando los resultados como función de la sección de corte y usando en algunos casos ideas de scaling para derivar propiedades críticas en dos y tres dimensiones.

En nuestro caso, resulta interesante estudiar la influencia de la segunda dimensión sobre las propiedades de localización de los sistemas inconmensurados. En este capítulo tomaremos los modelos bidimensionales introducidos en el capítulo anterior, veremos en qué casos son autoduales y además calcularemos longitudes de localización de cintas cuasi-unidimensionales, con el propósito de sacar conclusiones sobre el efecto de la segunda dimensión.

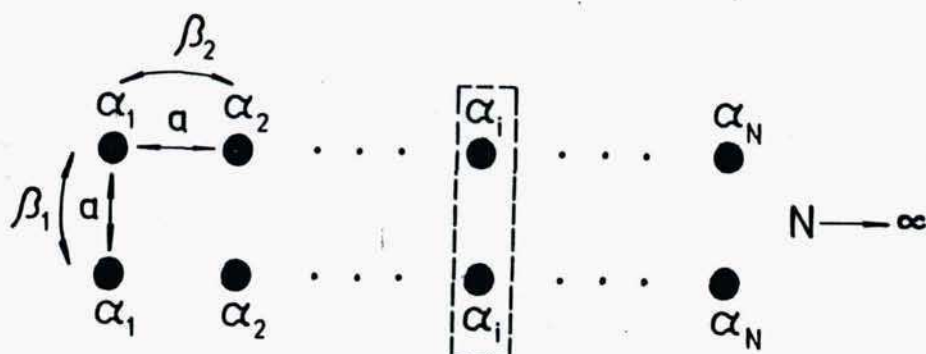
VIII.2 Búsqueda de la autodualidad en los sistemas bidimensionales

Para el problema unidimensional, Aubry y André mostraron que el modelo inconmensurado con modulación cosenoidal de las autoenergías de sitio es autodual, es decir que al transformar Fourier, el Hamiltoniano en el espacio k tiene la misma forma que en el espacio real. Esto implica la existencia de una transición metal-aislador independiente de la posición del nivel de Fermi⁽¹⁷⁾.

En esta sección determinaremos cuál o cuáles de los sistemas bidimensionales introducidos en el capítulo anterior es autodual y en las secciones subsiguientes investigaremos numéricamente las implicaciones de la autodualidad de los mismos.

VIII.2.1 Modelo en fase inconmensurado según una dirección

Consideraremos en primer lugar un sistema formado por dos ristas de átomos en fase, o sea:



Sea $\vec{\psi}_i = \begin{pmatrix} \psi_{1i} \\ \psi_{2i} \end{pmatrix}$ el vector formado por los coeficientes de la función de onda de uniones fuertes correspondientes al i -ésimo corte de la cinta, el cual aparece recuadrado en la figura.

Las ecuaciones del Hamiltoniano para este sistema tienen la siguiente forma:

$$E \vec{\Psi}_i = (\Delta\alpha/\beta_2) \cos(Qi+h) \vec{\Psi}_i + (\vec{\Psi}_{i-1} + \vec{\Psi}_{i+1}) + (\beta_1/\beta_2) \begin{pmatrix} \Psi_{2i} \\ \Psi_{1i} \end{pmatrix} \quad (8.1)$$

Las autoenergías de este sistema para $\Delta\alpha=0$. son:

$$E_{1,2}(k) = 2\beta_2 \cos(k) \pm \beta_1 \quad (8.2)$$

y las autofunciones para cada celda unidad, o sea en la base de ondas planas, son:

$$\vec{\Psi}^1(k) = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} (1/\sqrt{2}) \quad \vec{\Psi}^2(k) = \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} (1/\sqrt{2}) \quad (8.3)$$

Al introducir la inconmensuración, $\Delta\alpha \neq 0$, podemos suponer que el sistema tiene soluciones del tipo siguiente:

$$\vec{\Psi}_n^1 = \begin{pmatrix} e^{ikn} \\ e^{ikn} \end{pmatrix} \sum f_m e^{im(Qn+h)} \quad (8.4a)$$

$$\vec{\Psi}_n^2 = \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \vec{\Psi}_n^1 \quad (8.4b)$$

Propondremos como solución general una combinación lineal de

$\vec{\Psi}_n^1$ y $\vec{\Psi}_n^2$:

$$\vec{\Psi}_n = A \vec{\Psi}_n^1 + B \vec{\Psi}_n^2 \quad (8.5)$$

Introduciendo ahora (8.5) en (8.1) se obtiene

$$\begin{aligned}
 & E e^{ikn} \sum_m f_m e^{im(Qn+h)} \left[A \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} + B \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \right] = \\
 & ((\Delta\alpha/2) \cos(Qn+h) e^{ikn} \sum_m f_m e^{im(Qn+h)} + \\
 & + e^{ik(n-1)} \sum_m f_m e^{im(Q(n-1)+h)} + \\
 & + e^{ik(n+1)} \sum_m f_m e^{im(Q(n+1)+h)}) * \left[A \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} + B \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \right] + \\
 & + (\beta_1/\beta_2) e^{ikn} \sum_m f_m e^{imQ(n+h)} \left[A \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} + B \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \right]
 \end{aligned}
 \tag{8.6}$$

Reemplazando, ahora, $\cos(qn+h)$ por $(e^{i(Qn+h)} + e^{-i(Qn+h)})/2$, reagrupando términos e igualando coeficientes, se obtiene finalmente:

$$\begin{aligned}
 & (2E/\Delta\alpha) \beta_2 f_m \left[A \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} + B \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \right] = \\
 & = (f_{m-1} + f_{m+1}) \left[A \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} + B \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \right] + \\
 & + (4/\Delta\alpha) \beta_2 f_m \cos(Qm+k) \left[A \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} + B \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \right] + \\
 & + (2\beta_2/\Delta\alpha) (\beta_1/\beta_2) f_m \left[A \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} + B \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \right]
 \end{aligned}
 \tag{8.7}$$

reemplazando en (8.7):

$$\vec{F}_m = f_m \left[A \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} + B \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix} \right] \quad (8.8)$$

nos queda finalmente:

$$\begin{aligned} (2E/\Delta\alpha)\beta_2 \vec{F}_m &= (\vec{F}_{m-1} + \vec{F}_{m+1}) + \\ &+ (4/\Delta\alpha)\beta_2 \vec{F}_m \cos(Qm+k) + \\ &+ (2/\Delta\alpha)\beta_2 (\beta_1/\beta_2) \begin{pmatrix} F_{2,m} \\ F_{1,m} \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (8.9)$$

Las ecuaciones (8.9) son de la misma forma que las (8.1) si hacemos

$$(\Delta\alpha) = (2/\Delta\alpha)\beta_2, \quad h=k, \quad E = (2\beta_2/\Delta\alpha)E$$

$$(\beta_1/\beta_2) = (2/\Delta\alpha)\beta_2 (\beta_1/\beta_2) \quad y$$

$$\{\vec{\Psi}_m\} = \{\vec{F}_m\} \quad (8.10)$$

Vemos, entonces, que si encontramos una solución localizada \vec{F}_m , tal que $\sum |f_m|^2 < \infty$ y si (8.5) converge, entonces la mis-

ma es una solución de (8.1), tal que $\sum |\vec{\Psi}_n^1|^2 + |\vec{\Psi}_n^2|^2 = \infty$, de tal manera, que igual que en el caso unidimensional⁽¹⁷⁾, la transformación (8.5) intercambia localización por extensión. Aún no sabemos, de todos modos, cuáles de las autofunciones son extendidas y cuáles localizadas. Esto lo determinaremos numéricamente. De (8.10) se desprende que de existir una transición metal-aislador, ésta se producirá para $\Delta\alpha/\beta_2=2.$, independientemente del valor de Q , h y β_1 .

Con el objeto de generalizar a n ristras en fase, notemos primero, que el último término a la derecha de (8.1) no interviene en ninguno de los pasos algebraicos que efectuamos al realizar la transformación al espacio dual, mientras que el primer y segundo término a la derecha de la misma ecuación terminan transformándose en el segundo y primer término a la derecha de (8.9) respectivamente. El hecho de que todas las ristras se encuentren en fase tiene como consecuencia que no se mezclen las fases de los coeficientes de la función de onda correspondientes a la primera y segunda ristra y que finalmente el sistema resulte autodual. Suponiendo, ahora, que tenemos un sistema con n ristras en fase, entonces, las ecuaciones del Hamiltoniano de uniones fuertes serán:

$$E\vec{\Psi}_i = (\Delta\alpha/\beta_2)\cos(Qi+h)\vec{\Psi}_i + (\vec{\Psi}_{i-1} + \vec{\Psi}_{i+1}) +$$

$$+ (\beta_1/\beta_2) \begin{bmatrix} \Psi_{2,i} \\ \Psi_{1,i} + \Psi_{3,i} \\ \Psi_{2,i} + \Psi_{4,i} \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \Psi_{n,i} + \Psi_{n-2,i} \\ \Psi_{n-1,i} \end{bmatrix} \quad (8.11)$$

$\vec{\Psi}_i$ es un vector n -dimensional que contiene los coeficientes de la función de onda sobre los átomos de la i -ésima hilera.

Si $\{\vec{u}_i, i=1, n\}$ son los autovectores del sistema ordenado ($\Delta\alpha=0$), entonces podemos proponer la siguiente solución para (8.11):

$$\vec{\Psi}_i = \left[\sum_{j=1}^{\infty} A_j \vec{u}_j \right] \sum_{m=-\infty}^{\infty} f_m e^{im(Qi+h)} \quad (8.12)$$

Debido a que todas las ristras se encuentran en fase no se producirán inversiones al reemplazar (8.12) en (8.11) y haciendo el

mismo tipo de transformaciones algebraicas que hemos hecho en el caso de dos ristras, finalmente nos queda:

$$\begin{aligned}
 (2E/\Delta\alpha)\beta_2\vec{F}_m &= (\vec{F}_{m-1} + \vec{F}_{m+1}) + \\
 &+ (4/\Delta\alpha)\beta_2\vec{F}_m \cos(Qm + k) + \\
 &+ (2/\Delta\alpha)\beta_2(\beta_1/\beta_2) \begin{bmatrix} F_{2,m} \\ F_{1,m} + F_{3,m} \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ F_{n,m} + F_{n-2,m} \\ F_{n-1,m} \end{bmatrix}
 \end{aligned} \tag{8.13}$$

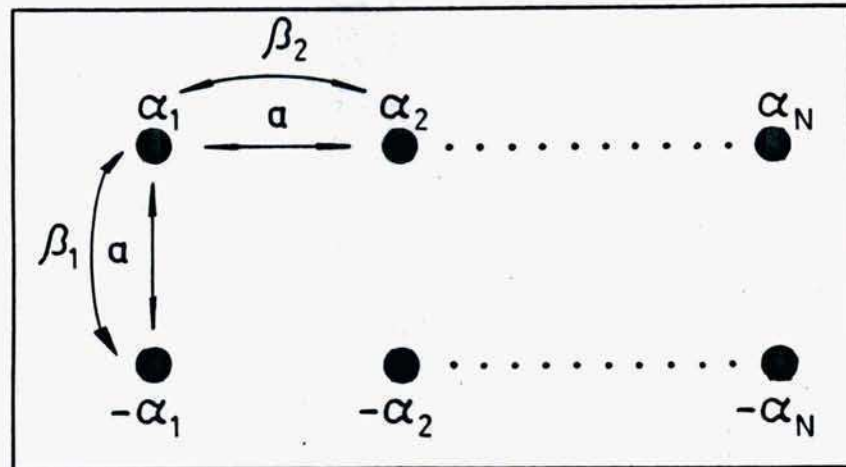
En este caso \vec{F}_m es un vector n-dimensional.

Encontramos, entonces que el sistema formado por n ristras en fase también es autodual y como en los casos anteriores de existir la transición metal-aislador ésta ocurrirá también para $\Delta\alpha/\beta_2=2$.

Haciendo tender n a infinito sacamos las mismas conclusiones para el sistema bidimensional con todas sus ristras en fase. (Modelo (i) de la sección VII.2)

VIII.2.2 Modelo en antifase inconmensurado según una dirección

Este es el modelo (ii) introducido en la sección VII.2 del capítulo anterior. Tal como hemos hecho en VIII.2.1 vamos a comenzar estudiando un sistema formado por dos ristras en antifase:



Para las dos ristas en antifase las ecuaciones del Hamiltoniano de uniones fuertes adoptan la siguiente forma:

$$E \vec{\Psi}_n = (\Delta\alpha/\beta_2) \cos(Qn+h) \begin{pmatrix} \Psi_{1,n} \\ -\Psi_{2,n} \end{pmatrix} +$$

$$+ [\vec{\Psi}_{n-1} + \vec{\Psi}_{n+1}] + (\beta_1/\beta_2) \begin{pmatrix} \Psi_{2,n} \\ \Psi_{1,n} \end{pmatrix} \quad (8.14)$$

Proponemos como solución para (8.14) la combinación de ondas planas (8.5). Introduciendo la misma en (8.14) y operando de manera semejante a como se hizo para el caso de dos cintas en fase, obtenemos:

$$2(\beta_2/\Delta\alpha) E \vec{F}_m = (4\beta_2/\Delta\alpha) \cos(Qm+h) \vec{F}_m +$$

$$+ \left(\begin{pmatrix} F_{1,m-1} \\ -F_{2,m-1} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} F_{1,m+1} \\ F_{2,m+1} \end{pmatrix} \right) +$$

$$+ (\beta_1/\beta_2) (2\beta_2/\Delta\alpha) \begin{pmatrix} F_{2,m} \\ F_{1,m} \end{pmatrix} \quad (8.15)$$

En (8.15) $\vec{F}_m = f_m \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} + B \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$. Comparando (8.15) y

(8.14) vemos que el sistema no es autodual, o sea que en este caso no existirá una transición metal-aislador, del tipo que hemos observado en el problema unidimensional con modulación tipo coseno.

Se generaliza fácilmente el problema de dos ristras en antifase a un sistema de n ristras en antifase, obteniéndose que este sistema tampoco es autodual.

VIII.2.3 Autodualidad en los sistemas inconmensurados según dos direcciones

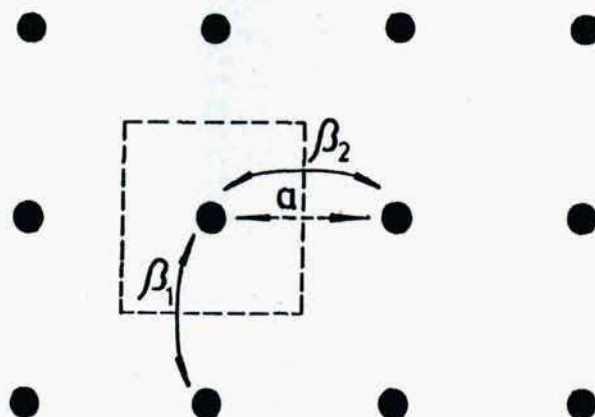
Mostraremos en esta sección que existe un modelo inconmensurado según dos direcciones que es autodual, o sea, que puede presentar una transición metal-aislador del tipo de la que posee el modelo de Aubry. Mostraremos, también, que el modelo (iii) no es autodual.

El modelo bidimensional e inconmensurado según dos direcciones será denotado de aquí en más como modelo (iv), las autoenergías de sitio del mismo tienen la siguiente forma:

$$\alpha(i,j) = \Delta\alpha(\cos(Q_1 i + h_1) + \cos(Q_2 j + h_2)) \quad (8.16)$$

$\alpha(i,j)$ es la autoenergía correspondiente al orbital que se encuentra en el sitio (i,j) , i es el índice según la dirección x y j según la dirección y .

El sistema sin inconmensuración ($\Delta\alpha=0$) tiene la siguiente celda unidad:



y sus autoenergías son de la forma:

$$E(\vec{k}) = 2\beta_2 \cos(k_x) + 2\beta_1 \cos(k_y) \quad a=1 \quad (8.17)$$

y las autofunciones son:

$$\psi_{i,j}(\vec{k}) = (1/\Omega) e^{i(k_x, k_y)(i,j)} \quad (8.18)$$

Ω es el volumen del sistema en consideración.

La ecuación de Schroedinger para este sistema será:

$$(E - \alpha_{n,m}) \psi_{n,m} = (\psi_{n+1,m} + \psi_{n-1,m}) \beta_2 + (\psi_{n,m-1} + \psi_{n,m+1}) \beta_1 \quad (8.19)$$

Teniendo en cuenta la solución (8.18) para el sistema ordenado y a semejanza con lo propuesto para los sistemas con incommensuración según una dirección, proponemos para (8.19) la siguiente solución:

$$\psi_{n,m} = e^{i\vec{k}(n,m)} \sum_{r,j} f_{r,j} e^{i(r,j) [(Q_1 n + h_1), (Q_2 m + h_2)]} \quad (8.20)$$

Introduciendo (8.20) en (8.19) y realizando el mismo tipo de transformaciones algebraicas que en las secciones anteriores se obtiene:

$$\begin{aligned}
 (2/\Delta\alpha)E f_{r,j} = & (4/\Delta\alpha)\beta_2 \cos(Q_1 r + k_x) f_{r,j} + \\
 & + (4/\Delta\alpha)\beta_1 \cos(Q_2 j + k_y) f_{r,j} + (f_{r-1,j} + f_{r+1,j}) + \\
 & + (f_{r,j-1} + f_{r,j+1})
 \end{aligned}
 \tag{8.21}$$

Si $\beta_1 = \beta_2 = \beta$ el sistema es autodual y existe la posibilidad de que posea una transición metal-aislador del tipo anterior.

Del desarrollo que lleva de (8.19) a (8.21) se desprende que los dos términos en diferencias finitas que aparecen a la derecha de la igualdad (8.19) conducen inexorablemente a los dos cosenos que aparecen en (8.21), de esto se infiere que el modelo (iii) cuyas autoenergías de sitio son de la forma:

$$\alpha(n, m) = \Delta \alpha \cos(Q_1 n + Q_2 m + h_1 + h_2) \tag{8.22}$$

no puede ser autodual.

En general, podemos asegurar que si tenemos un sistema de uniones fuertes n -dimensional, tal que sus términos de autoenergía son de la forma:

$$\alpha(n_1, n_2, \dots, n_N) = \Delta \alpha \left(\sum_{i=1}^N \cos(Q_i n_i + h_i) \right) \tag{8.23}$$

y las interacciones son sólo entre primeros vecinos, entonces el sistema será autodual y de existir una transición metal-aislador de este tipo, ésta se producirá para $\Delta\alpha/\beta=2$. ($\beta_1 = \beta_2 = \beta$).

Notemos que el sistema que tiene por autoenergías de sitio a (8.22), sólo será autodual si Q_1 o Q_2 es igual a un múltiplo entero de 2π , transformándose entonces el sistema en el problema en fase. El problema en antifase es también un caso particular de (8.22) si Q_1 o Q_2 es múltiplo entero impar de π y no es autodual.

VIII.3 Estudio de la localización en los sistemas incon- mensurados de más de una dimensión

Nuestro objetivo en esta sección es calcular el coeficiente de crecimiento exponencial de las funciones de onda para ristras en fase (modelo i) y en antifase (modelo ii). Debido a dificultades numéricas que se nos presentaron y que comentaremos en la sección VIII.4, decidimos hacer un primer cálculo aproximado de la localización en estos sistemas usando la diagonalización directa de cintas formadas por dos ristras en fase o en antifase.

Las autofunciones de estos sistemas se pueden escribir como:

$$\Psi(E_i) = \sum_{j,1}^i c_{j,1}^i \phi_{j,1} \quad (8.24)$$

en esta expresión E_i es la autoenergía correspondiente a esta autofunción y $\phi_{j,1}$ es el orbital atómico sobre el átomo que se encuentra en la posición $(j,1)$.

Hemos tomado como medida de la localización a

$$C^4(E_i) = \sum_{j,1} [c_{j,1}^i]^4 \quad (8.25)$$

ya que si el estado es extendido todos los coeficientes $c_{j,1}^i$ elevados a la cuarta serán del orden de $(1/N)^2$ debido a la normalización de la función de onda, y por lo tanto C^4 será del orden de $(1/N)$. N es el número de orbitales considerados. Si el estado es localizado habrá tan sólo uno o pocos de los coeficientes cuyo valor sea significativo y el resto de los coeficientes elevados a la cuarta serán de valor despreciable frente a los otros, $C^4(E_i)$ será en estos casos mayor que $(1/N)$ y se aproximará tanto más a 1. cuanto más localizado sea el autoestado considerado⁽⁶⁵⁾.

Con los valores obtenidos para $c^4(E_i)$ hemos construido histogramas en función de la energía. En la sección VIII.4 reproducimos los resultados obtenidos de esta forma y los comparamos con los obtenidos calculando $\gamma(E)$ por medio del formalismo de la matriz transferencia.

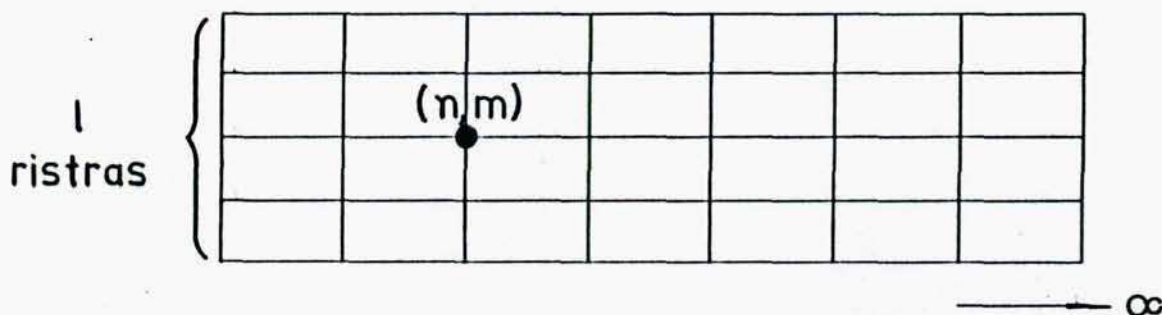
Hay esencialmente dos métodos para calcular $\gamma(E)$, uno es el método de la función de Green⁽⁶⁰⁾ y otro es el método de la matriz transferencia^[51,58,59,62]. Dado que nosotros no hemos usado el método de la función de Green en todo lo anterior, cumplimos en mencionarlo como alternativa de cálculo y recalcar que conducen esencialmente a los mismos resultados.

A continuación describimos el método que utilizamos siguiendo la muy buena exposición hecha por Pichard en su Tesis Doctoral⁽⁵¹⁾.

Reescribamos la ecuación de Schroedinger para un sistema bidimensional:

$$(E - \alpha(n, m)) \psi_{n, m} = (\psi_{n+1, m} + \psi_{n-1, m}) \beta_2 + (\psi_{n, m-1} + \psi_{n, m+1}) \beta_1 \quad (8.26)$$

El índice n indica la posición según x y m según y . Sea la cinta a considerar una de ancho l :



(8.26) se puede reescribir en forma matricial de la siguiente forma:

$$\begin{pmatrix} |u_{n+1}\rangle \\ |u_n\rangle \end{pmatrix} = T_n \begin{pmatrix} |u_n\rangle \\ |u_{n-1}\rangle \end{pmatrix} \quad (8.27)$$

T_n es la matriz transferencia:

$$T_n = \begin{bmatrix} (E \cdot I - \alpha_n - T\beta_2)/\beta_1 & -I \\ I & 0 \end{bmatrix} \quad (8.28)$$

α_n y T son matrices de dimensión $l \times l$, I es la matriz unidad, $|u_n\rangle$ es un vector de l componentes, constituido por los valores de la función de onda sobre los l sitios de una sección transversa de la cinta con abscisa n , o sea:

$$|u_n\rangle = \begin{pmatrix} \psi_{n,1} \\ \psi_{n,2} \\ . \\ . \\ \psi_{n,l} \end{pmatrix} \quad \alpha_n = \begin{bmatrix} \alpha_{n,1} & & 0 \\ & \alpha_{n,2} & \\ & & . \\ 0 & & & . \\ & & & & \alpha_{n,l} \end{bmatrix}$$

$$T = \begin{bmatrix} 0 & -1 & & & & b \\ -1 & 0 & -1 & & & \\ & -1 & 0 & -1 & & \\ & & . & . & & \\ & & . & . & . & \\ b & & & -1 & 0 & -1 \end{bmatrix} \quad (8.29)$$

El coeficiente b que figura en T es función de las condiciones de borde impuestas lateralmente al sistema; $b=-1$ implica condiciones periódicas de contorno, $b=1$ condiciones antiperiódicas y $b=0$ implica tener contornos abiertos. En nuestros cálculos hemos usado $b=0$ con el objeto de poder comparar los resultados con las densidades de estado ya calculadas.

Dados 2 vectores iniciales $|u_0\rangle$ y $|u_1\rangle$ el comportamiento de $|u_n\rangle$ está dado por:

$$M_n = \prod_i T_i \quad (8.30)$$

M_n satisface las condiciones del teorema de Oseledec⁽⁵¹⁾, o sea que en el límite en el cual n tiende a infinito, la matriz $\Lambda = \lim_{n \rightarrow \infty} (M_n M_n^+)^{1/2n}$ converge a una matriz límite, implicando ésto que el módulo de los autovalores de M_n y los correspondientes autovectores están bien determinados.

Sean $\lambda_i = \exp(\gamma_i)$, con i de 1 a $2l$, los autovalores de la matriz Λ , o sea los γ_i , son los llamados exponentes característicos de Lyapunov^[51,62] del producto de matrices M_n . Si (U_1, \dots, U_{2l}) son los subespacios propios de Λ correspondientes a los autovalores λ_i se verifica que:

$$\gamma_i = \lim_{n \rightarrow \infty} (1/n) \log |M_n |u_i\rangle| / ||u_i\rangle|$$

para todo $|u_i\rangle$ perteneciente a U_i

(8.31)

Los coeficientes de Lyapunov no son, entonces, otra cosa más que los coeficientes de crecimiento exponencial de las funciones de onda del sistema a través de los posibles canales de propagación de la cinta. Se puede identificar a la inversa de γ_i con las longitudes de localización dentro de la cinta de ancho 1, siempre que n sea grande. Cuando esta tesis ya estaba escrita nos llegó un trabajo de Pastawski et al. en el cual los autores prueban teóricamente y verifican en forma numérica la equivalencia entre la longitud de localización de las autofunciones de un sistema y el coeficiente más chico y positivo de Lyapunov, obtenido de un producto de matrices transferencia, cualquiera sea la dimensión del sistema⁽⁶⁷⁾.

Definiremos como longitud de localización ξ_1 de una cinta de sección transversa 1 a la inversa del más pequeño de los coeficientes de Lyapunov positivos.

Hasta ahora no nos hemos ocupado de las dificultades que hay para obtener los autovalores de la matriz M_n . Las matrices T_n son matrices simplécticas, de tal forma que se cumple lo siguiente:

$$T_n^+ J T_n = J \quad J = \begin{bmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \quad (8.32)$$

Las matrices simplécticas forman grupo, o sea que si M_n es una matriz simpléctica Λ también lo será, además de ser Hermítica.

Los autovalores de Λ^{2n} además de ser reales, tienen la propiedad de que si μ es autovalor, entonces $1/\mu$ también lo será.

Debido a la característica de ser simplécticas, al multiplicar estas matrices rápidamente se pierde precisión en el cálculo y tan sólo el autovalor más grande de $\Lambda^{1/2n}$ puede ser determinado con precisión suficiente, pero es precisamente el autovalor más pequeño el que nos dará la longitud de localización que esperamos obtener. Esta dificultad, que nos llevó tiempo superar, no existía en el caso unidimensional, dado que Λ tenía tan sólo dos autovalores $1/\mu$ y μ . Aplicando directamente el producto M_n sobre cualquier vector inicial, el resultado converge al mayor de los autovalores de M_n que da automáticamente el único coeficiente de Lyapunov positivo del sistema.

La dificultad mencionada se resuelve, utilizando un algoritmo suplementario^[51,62] establecido por Shimada y Nagashima⁽⁶³⁾ en el estudio de la estocasticidad en los sistemas dinámicos.

Sean $|e_1\rangle, |e_2\rangle, \dots, |e_p\rangle$, $1 \leq p \leq 21$, vectores linealmente independientes definidos en R^{21} , en donde operan las matrices T_i y sus productos M_n . Sea $(|e_1\rangle, \dots, |e_p\rangle)$ el volumen del paralelepípedo engendrado por estos p vectores.

Si aplicamos M_n a los vectores ortonormales $|e_i\rangle$, podemos obtener: $\gamma_1, \gamma_1+\gamma_2, \gamma_1+\gamma_2+\gamma_3, \text{etc.}$, y por sucesivas restas se pueden obtener $\gamma_1, \gamma_2, \dots, \text{etc.}$, siendo $\gamma_1 \gamma_2 \dots \gamma_l$ y $\gamma_1 = -\gamma_{21}, \gamma_2 = -\gamma_{21-1}, \text{etc.}$

Con el objeto de evitar que la norma de cada vector $M_n |e_i\rangle$ diverja exponencialmente como $\exp(\gamma_1 n)$ y que la dirección asintótica de $M_n |e_i\rangle$ sea la dada por el subespacio correspondiente a γ_1 , estos autores sugirieron la ortonormalización aplicada a cada vector columna B_i^n del producto de n matrices:

$$\vec{B}_i^{n*} = (\vec{B}_i^n - \sum_{j \leq i} (\vec{B}_j^{n*} \vec{B}_i^n) \vec{B}_j^n) / b_n^{(i)}$$

$$b_n^{(i)} = |\vec{B}_i^n - \sum_{j \leq i} (\vec{B}_j^{n*} \vec{B}_i^n) \vec{B}_j^n|$$

(8.33)

De esta manera, cada columna se ortonormaliza a la anterior, lo cual es equivalente a decir que se están restando los subespacios correspondientes a los γ_i más grandes. La primera colum-

na converge al autovector correspondiente al autovalor más grande, la segunda columna al segundo más grande y así sucesivamente y queda solucionada la dificultad numérica mencionada.

Volviendo a (8.3) nos queda finalmente para una cinta de ancho 1:

$$\gamma_i^{(n)} = c_n^{(1)}/n \quad (8.34)$$

en donde

$$c_n^{(1)} = \ln b_n^{(1)} + c_{n-1}^{(1)} \quad \text{con } c_0 = 0.$$

Esta normalización no es necesario hacerla después de cada multiplicación. En nuestros cálculos hemos comprobado que exigiendo que el valor absoluto de la matriz producto no sea mayor que 10. se obtienen buenos resultados, es decir que los γ_i salen, dentro de la precisión de máquina, simétricos con respecto a cero.

VIII.4 Cálculos y resultados

VIII.4.1 Diagonalización directa

Hemos calculado las autofunciones y autovalores para cintas de dos ristras en fase y en antifase. En todos los casos $Q/2\pi = (\sqrt{13} - 3)/2$, $\beta_1 = \beta_2 = 1$. y además cada ristra está compuesta por 50 átomos, o sea que cada cinta posee 100 átomos en total. Imprimimos para cada autoenergía los coeficientes de la autofunción correspondiente y $C^4(E_i)$. Comparando los valores obtenidos para $C^4(E_i)$ para distintos valores de $\Delta\alpha$ en ambos modelos, con los coeficientes de las autofunciones, hemos concluido que, aproximadamente, $C^4(E_i) \ll 0.05$ implica estado extendido

y $C^4(E_i) \gg .05$ estado localizado. Para construir los histogramas de $C^4(E)$ vs energía, E , escogimos un paso de energías, ΔE , igual a $.5\beta$ en todos los casos y promediamos los $C^4(E_i)$ obtenidos en los distintos intervalos. Hemos usado un ΔE grande debido a que tenemos pocos estados. Los contornos están abiertos.

En la fig VIII.1(A,B y C) mostramos los histogramas obtenidos para $\Delta\alpha=1.$ y $2.$ y $\beta_1=\beta_2=1.$ para el modelo unidimensional con modulación tipo coseno, para dos ristras en fase y dos ristras en antifase. Vemos de la figura que los histogramas correspondientes al modelo unidimensional y al modelo en fase son muy similares, en el sentido de que $C^4(E)$ es bastante uniforme en ambos casos. El modelo en antifase presenta un comportamiento muy distinto, con una localización no uniforme de sus estados, localizándose primero, en apariencia, los estados que se encuentran en el centro de la banda.

En la fig VIII.2 ploteamos :

$$C_T^4 = (1/N) \sum_i C^4(E_i) \quad (8.35)$$

en función de $\Delta\alpha$ para el modelo unidimensional y para dos ristras en fase y en antifase; vemos que para el modelo en fase y para el unidimensional hay una transición abrupta en $\Delta\alpha= 2$, mientras que las dos cintas en antifase no presentan esta transición.

Se verá en la sección siguiente, que la diagonalización directa, a pesar de la imprecisión debida a los pocos estados, da una idea aproximada de las características de la localización en los sistemas bidimensionales.

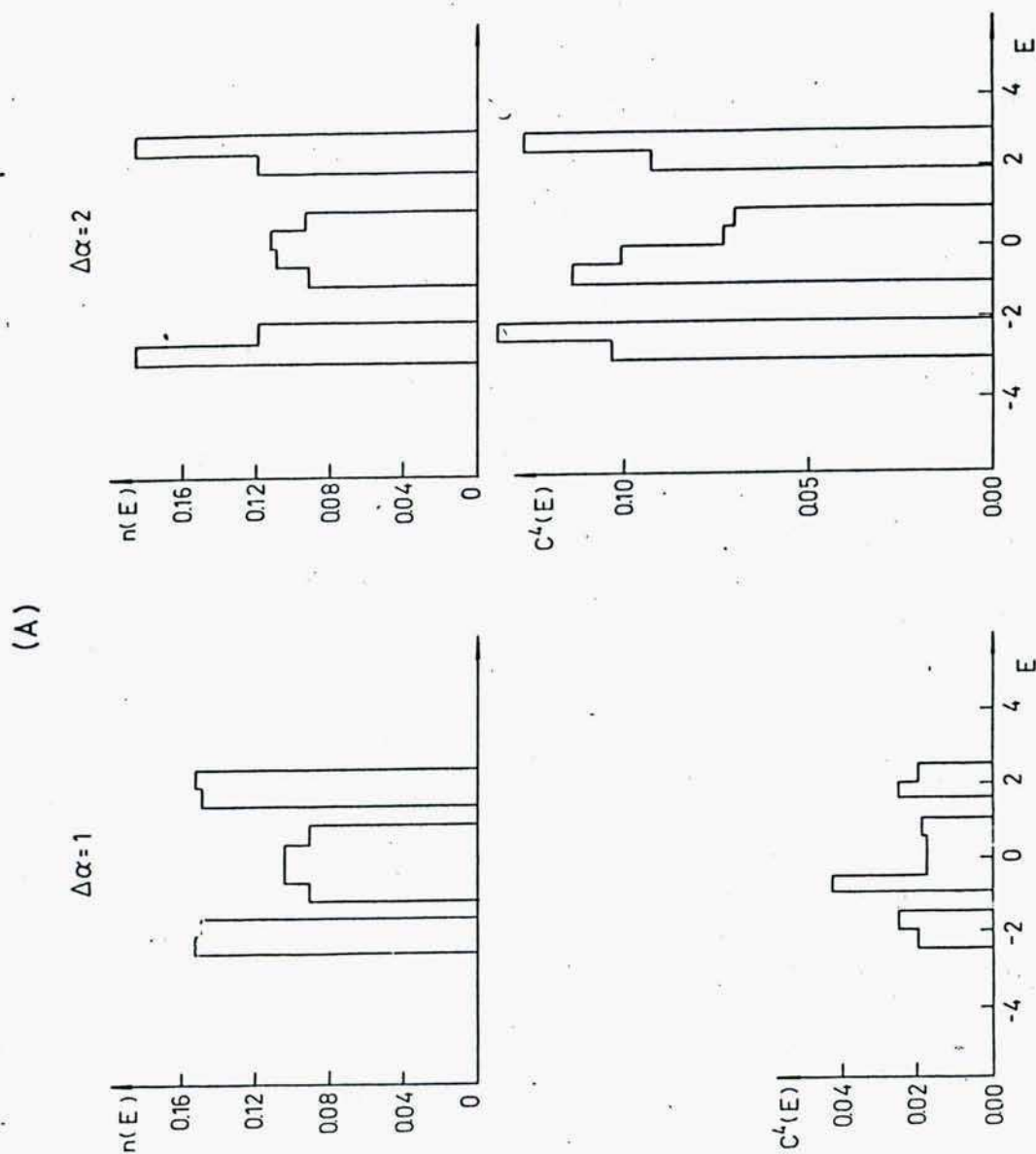


FIGURA VIII.1A Histogramas de $n(E)$ y $C^4(E)$ para la cadena unidimensional incommensurada con modulación tipo cosen θ , para dos valores de $\Delta\alpha$, $0/2\pi = (\sqrt{13} - 3)/2$

(B)

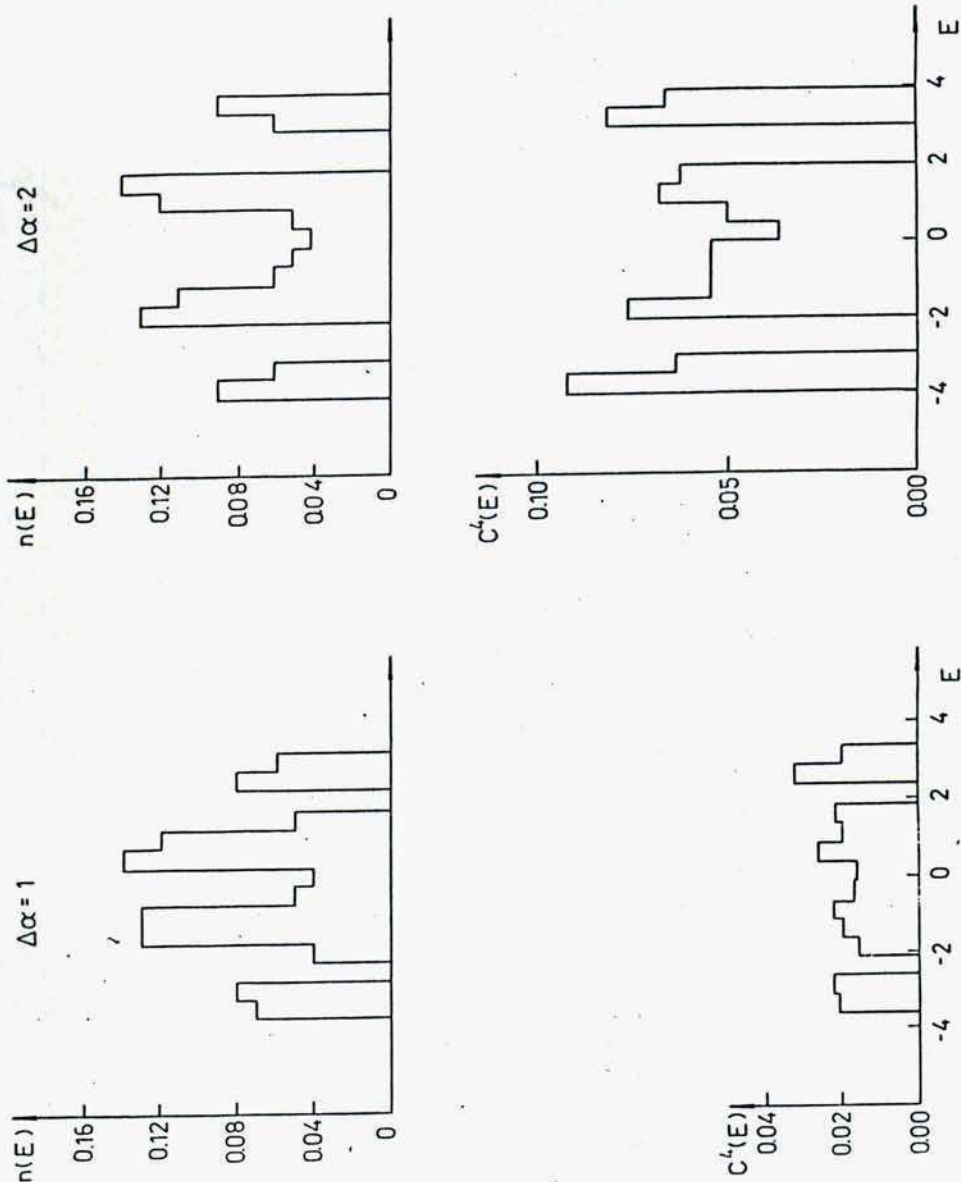


FIGURA VIII.1B: Idem figura VIII.1A, pero para dos ristas de átomos en fase. $\beta_1 = \beta_2 = 1$.

(C)

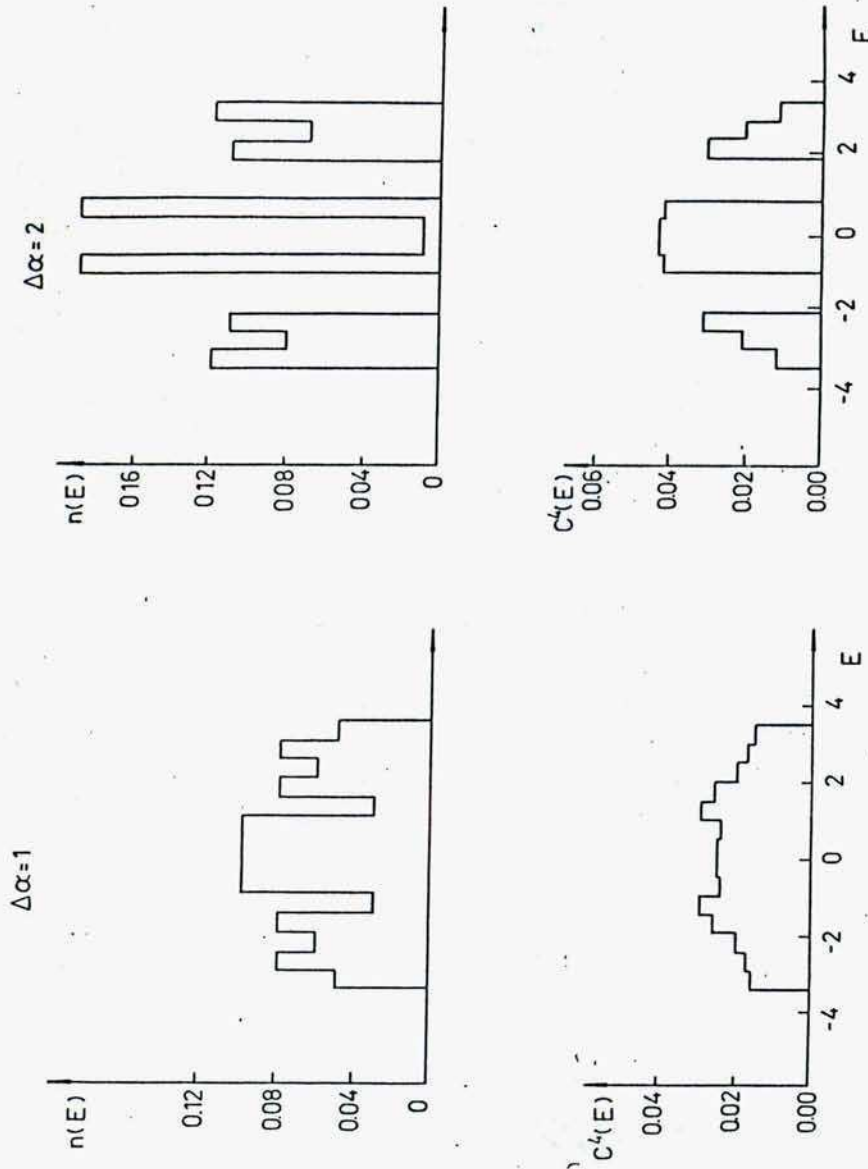


FIGURA VIII.1C: Idem figura VIII.1A y C pero para una cinta formada por dos rístras en antifase.

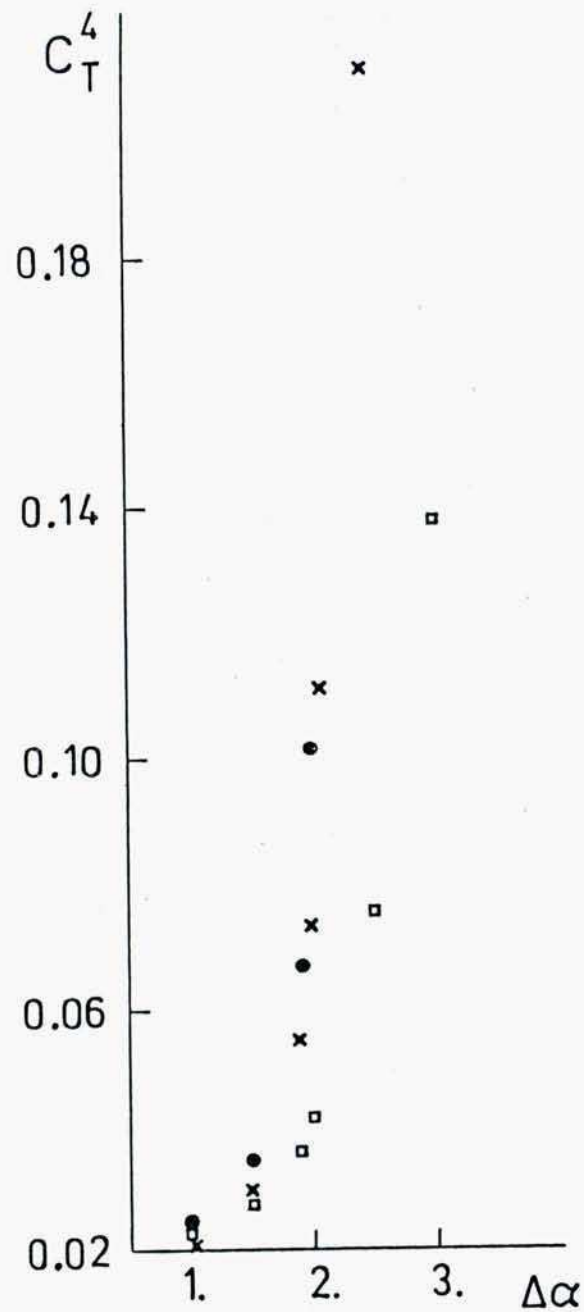


FIGURA VIII.2: C_T^4 en función de $\Delta\alpha$. Los puntos negros corresponden al modelo unidimensional con modulación coseno, las cruces al sistema formado por dos rístras en fase y los cuadrados a dos rístras en antifase.

VIII.4.2 Método de la matriz transferencia

El programa utilizado para calcular los coeficientes de Lyapunov para cintas de ancho variable está escrito en doble precisión y calcula los mismos utilizando las ecuaciones (8.37) y (8.38). Con el objeto de verificar la bondad del mismo calculamos los cinco primeros coeficientes de Lyapunov para una cinta de cinco ristras sin inconmensuración ($\Delta\alpha=0$), con condiciones cíclicas de contorno para una energía ligeramente fuera de la banda ($E=5.$) y hemos comparado los resultados con los obtenidos por Pichard y con el resultado exacto⁽⁵¹⁾.

Los resultados analíticos son los siguientes:

γ_1	γ_2	γ_3	γ_4	γ_5
1.866142284	1.866142284	1.420803547	1.420803547	0.96242380

TABLA VIII.1: Coeficientes de Lyapunov para una cinta de cinco ristras. $\Delta\alpha=0$. $E=5$. Resultados exactos⁽⁵¹⁾.

Los resultados obtenidos por Pichard para 10, 100, 5000 y 25000 aplicaciones de la matriz transferencia renormalizando cada 10 productos son:

N	γ_1	γ_2	γ_3	γ_4	γ_5
10	1.8322562	1.9128114	1.5069079	1.4118106	1.1106403
100	1.8627508	1.8708087	1.4294130	1.4198777	0.9779186
5000	1.8660744	1.8662356	1.4209757	1.4207850	0.9627335
25E3	1.8661287	1.8661695	1.4208380	1.4207998	0.9624856

TABLA VIII.2: Coeficientes de Lyapunov calculados por Pichard para el ejemplo de la tabla VIII.1

En lugar de renormalizar cada 10 productos, nosotros, hemos exigido que el valor absoluto de ninguno de los elementos de la matriz producto supere el valor 10. Obtenemos para las cinco ristraas sin inconmensuración ($E=5$) los siguientes resultados:

N	γ_1	γ_2	γ_3	γ_4	γ_5
10	1.8239410	1.7708410	1.4642801	1.4592727	1.0654617
100	1.8619214	1.8566075	1.4251538	1.4246520	.97272883
1000	1.8657202	1.8651888	1.4212386	1.4211884	.96345417
5000	1.8660579	1.8659516	1.4208906	1.4208805	.96262975

TABLA VIII.3: Coeficientes de Lyapunov obtenidos por nosotros para el ejemplo de la tabla VIII.1

Tomando cadenas de 5000 átomos consideramos que obtenemos resultados con precisión adecuada y además, de esta manera obtenemos coeficientes de Lyapunov, que dentro de la precisión de máquina son simétricos (los coeficientes de Lyapunov negativos no figuran en la tabla).

Nuestro criterio de localización será el siguiente: si el valor del coeficiente más chico, positivo, que desde ahora denotaremos como $\gamma(E)$, es $\approx 1/N$, entonces diremos que la energía considerada corresponde a un estado extendido. Si el mismo es mayor que $1/N$ consideraremos que nos encontramos en un gap o que la energía en cuestión corresponde a un estado localizado. Con el objeto de determinar si nos encontramos en presencia de un gap ó de estados localizados compararemos los resultados obtenidos para $\gamma(E)$ con los histogramas de la densidad de estados correspondientes.

a) Ristras en fase

En todos los cálculos $N=5000$, $\beta_1=\beta_2=1$. y $Q/(2\pi) = (\sqrt{13}-3)/2$.

Antes de calcular $\gamma(E)$ a lo largo de la banda, hemos calculado $\gamma(E)$ para $E=0$. y 2, 3, 4, 5 y 6 ristras, tanto para $\Delta\alpha=1.9$ como para $\Delta\alpha=2.1$, obteniéndose los siguientes resultados:

N de ristras	$\Delta\alpha$	$\gamma(0)$
2	1.9	.429
2	2.1	.455
3	1.9	.2 10^{-3}
3	2.1	.049
4	1.9	.202
4	2.1	.271
5	1.9	.24 10^{-3}
5	2.1	.049
6	1.9	.229
6	2.1	.273

TABLA VIII.4: $\gamma(0)$ para 2,3,4,5, y 6 ristras en fase.
 $N=5000$, $\beta_1=\beta_2=1$.

De la tabla se desprende, que para 2,4 y 6 ristras (número par de ristras) o bien no hay estados en $E=0$ o hay estados localizados. Veremos en los histogramas de $n(E)$ para dos ristras en fase que en $E=0$ existe un gap tanto para $\Delta\alpha=1.9$ como para $\Delta\alpha=2.1$. Para 3 y 5 ristras hay estados en $E=0$ y observamos que el comportamiento varía al pasar de $\Delta\alpha=1.9$ a 2.1. Para 1.9 el

estado es extendido y para 2.1 es localizado. Nótese que aún cuando para un número par de ristras no hay estados en $E=0$, a medida que aumenta el número de ristras tiende a disminuir el valor de $\gamma(0)$, lo cual está indicando que el gap se hace cada vez más pequeño, ésto era de esperarse dado que en el límite de infinitas ristras no hay gap en $E=0$. (ver Capítulo VII).

Hemos barrido para el caso de dos ristras en fase toda la banda de energías para $\Delta\alpha=1.9$ y 2.1. Se observa en este problema un comportamiento similar al observado en el modelo unidimensional con modulación coseno. Para $\Delta\alpha=1.9$ y haciendo un barrido grueso con $\Delta E = .1$, se perfila la posición de las bandas de energía pero para detectar bandas de estados extendidos hay que hacer un barrido mucho más fino. Mientras que en el problema unidimensional con un $\Delta E = 0.0026$ (en unidades de β) se podían "ver" las bandas de estados extendidos, para dos ristras en fase el ΔE que se necesita es de aproximadamente 0.0006, las bandas son más angostas que en el problema unidimensional. Haciendo un barrido fino llegamos a la conclusión de que para $\Delta\alpha=1.9$ existen bandas de estados extendidos a lo ancho de toda la banda de energías. En la figura VIII.3 aparecen la densidad de estados y $\gamma(E)$ para este caso. Hacemos notar que al graficar $\gamma(E)$ en los lugares en los cuales $n(E)$ es distinto de cero hemos adoptado el criterio de no graficar los minigaps. En la misma figura VIII.3 aparecen $n(E)$ y $\gamma(E)$ para dos ristras en fase y $\Delta\alpha=2.1$. En este caso hemos llevado a cabo el mismo tipo de barrido que para $\Delta\alpha=1.9$, obteniéndose que en ningún caso $\gamma(E) \leq .049$. Llegamos a la conclusión de que para $\Delta\alpha=2.1$ los estados localizados forman un espectro denso. Se ha producido una transición metal-aislador entre los dos valores de $\Delta\alpha$ considerados. En el caso unidimensional, tampoco podíamos bajar del valor .049 para $\gamma(E)$ al barrer la banda para $\Delta\alpha=2.1$.

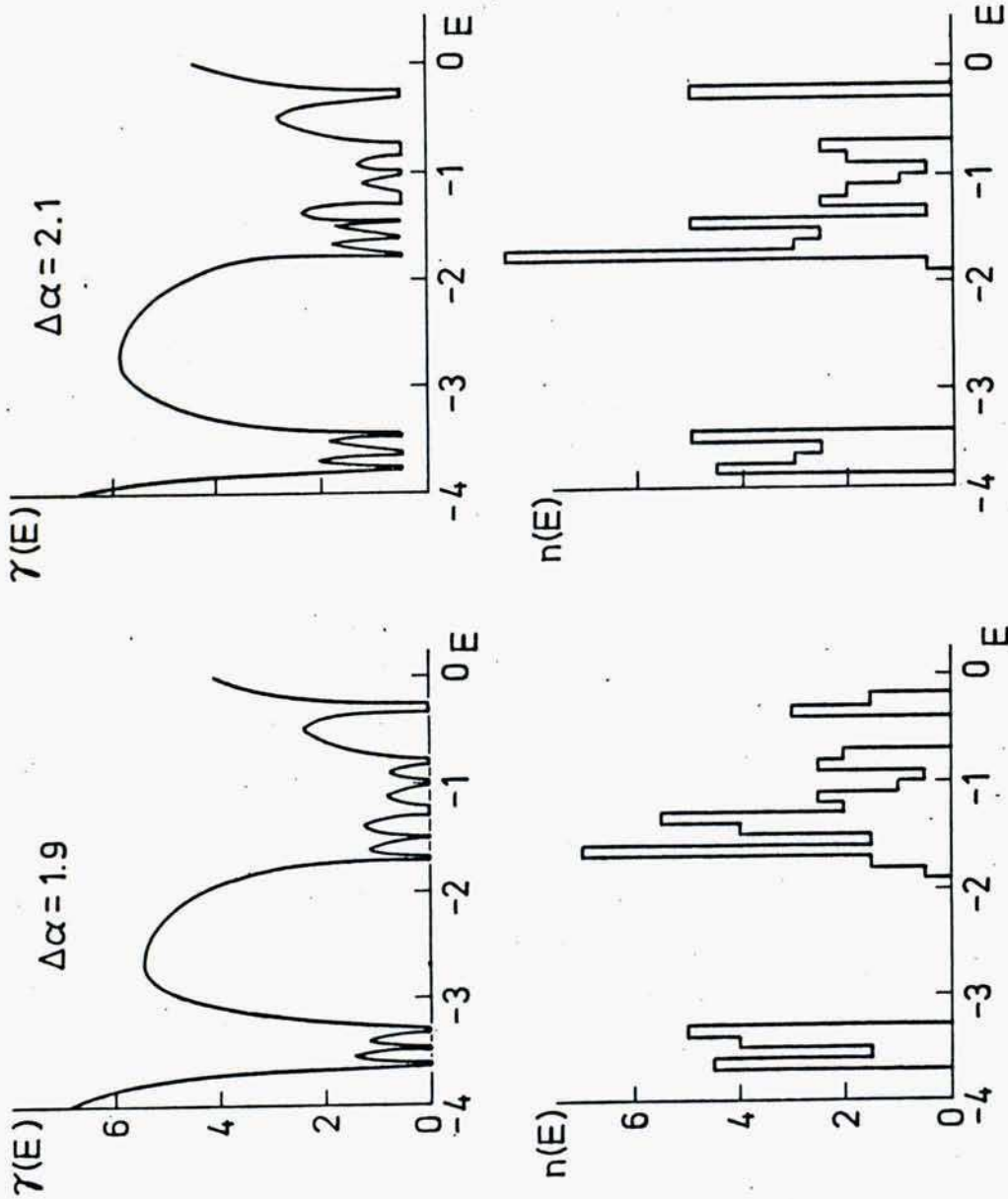


FIGURA VIII.3: $n(E)$ y $\gamma(E)$ para dos rístras en fase para dos valores de $\Delta\alpha$, para la mitad de la banda. $Q/2\pi = (\sqrt{13} - 3)/2$, $\beta_1 = \beta_2 = 1$.

b) Ristras en anti-fase

Nuevamente todos los cálculos fueron hechos para $N=5000$, $\beta_1=\beta_2=1$, $Q/2\pi=(\sqrt{13}-3)/2$. Como en el caso anterior hemos calculado primero $\gamma_i(E)$ para $E=0$, para 2, 3, 4, 5 y 6 ristras, tanto para $\Delta\alpha=1.9$ como para 2.1, obteniéndose los resultados que aparecen en la tabla:

N de ristras	$\Delta\alpha$	$\gamma(E)$
2	1.9	.411
2	2.1	.471
3	1.9	.281 10^{-3}
3	2.1	.049
4	1.9	.294
4	2.1	.351
5	1.9	.241 10^{-3}
5	2.1	.049
6	1.9	.223
6	2.1	.284

TABLA VIII.5: Idem tabla VIII.4 pero para ristras en antifase.

Como en el caso de las ristras en fase, vemos que cuando se tiene un número impar de estados, existe un estado en $E=0$. y cuando el número de ristras es par hay un gap en $E=0$. Los sistemas con un número impar de ristras presentan en $E=0$. un estado extendido para $\Delta\alpha=1.9$ y localizado para 2.1, con los mismos valores para $\gamma(0)$ que para las ristras en fase. $\gamma(0)$ va disminuyendo de valor en los sistemas con número par de ristras, de la misma manera como lo hacía para dos ristras en fase. Si uno se limitase a estudiar $\gamma(0)$ diría, entonces, que el sistema en antifase presenta también una transición metal-aislador entre $\Delta\alpha=1.9$ y 2.1.

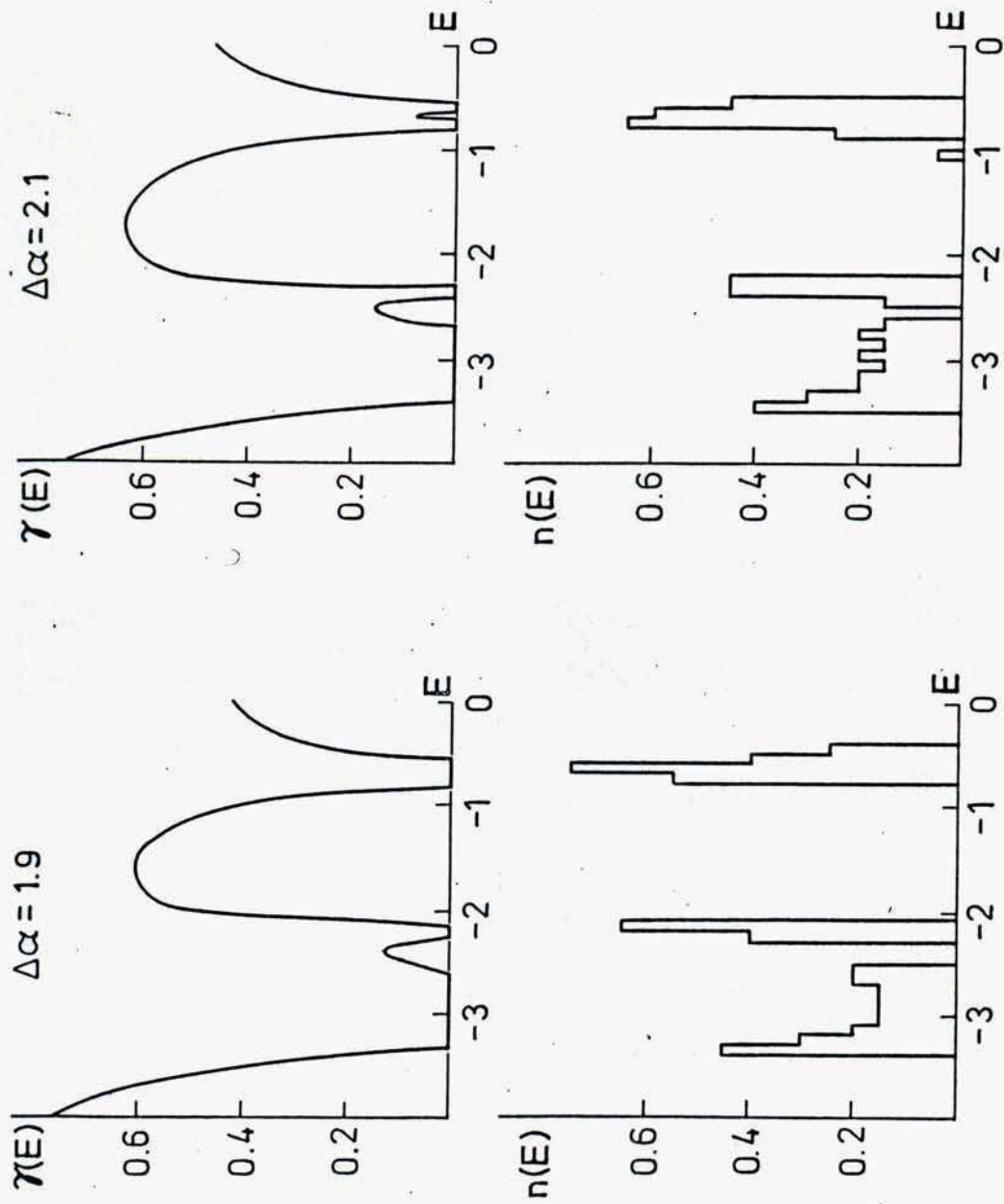


FIGURA VIII.4: Idem figura VIII.3 pero para dos ristas en antifase.

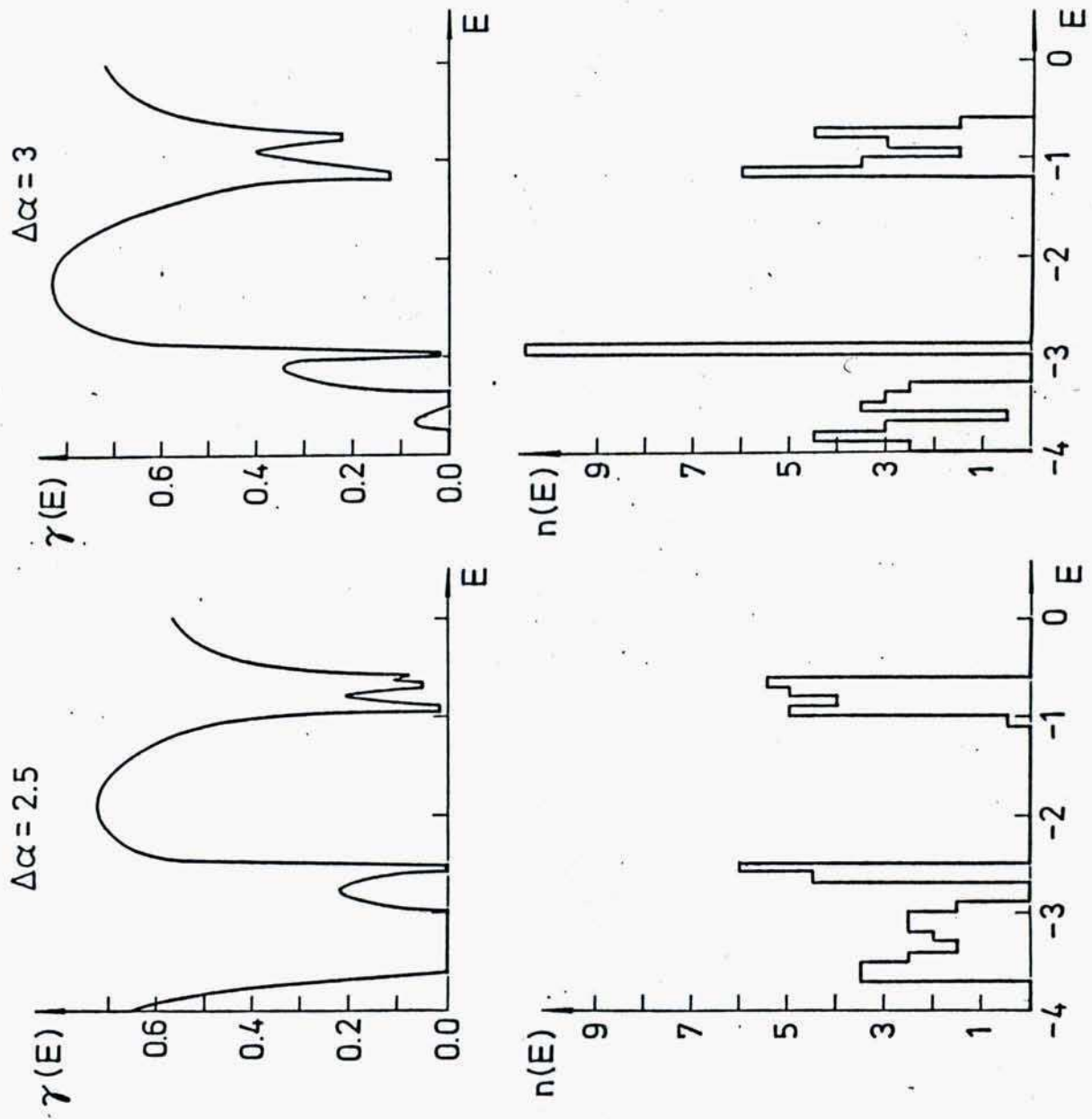


FIGURA VIII.5: Idem figura VIII.4

Barriendo la banda para distintos valores de $\Delta\alpha$ se obtienen los resultados que aparecen en las figuras VIII.4 y VIII.5 para dos cintas en antifase y $\Delta\alpha=1.9, 2.1, 2.5$ y 3 . Para $\Delta\alpha=1.9$ todos, o la mayor parte de los estados son extendidos y las bandas más anchas que en el caso de dos ristras en fase, de tal manera que no es necesario hacer barridos con pasos de energía tan pequeños como en el caso de las ristras en fase. Para $\Delta\alpha=2.1$ también los estados son extendidos, aunque las bandas comienzan a hacerse más angostas cerca de $E=0$. Para $\Delta\alpha=2.5$ las bandas de los extremos siguen teniendo carácter extendido, mientras que las que están más cerca de $E=0$ se han localizado. Para $\Delta\alpha=3$ todavía quedan bandas sin localizar en los extremos, mientras que las bandas internas se han ido localizando en forma escalonada.

Hemos calculado $\gamma(E)$ también para tres ristras en antifase y $\Delta\alpha=2.1$, observándose que también la bandita en los alrededores de $E=0$ se ha localizado para este valor de $\Delta\alpha$, mientras que el resto de la banda continúa extendida.

Tal como habíamos concluido provisoriamente de los resultados obtenidos por diagonalización directa de una matriz de 100×100 ; los sistemas en antifase se localizan a partir del centro de la banda y hacia los extremos de la misma.

VIII.5 Conclusiones

En este capítulo hemos estudiado los efectos que provoca la introducción de una segunda dimensión en la localización de las funciones de onda de los sistemas inconmensurados. Hemos obtenido varios resultados interesantes:

a) Utilizando criterios de autodualidad hemos mostrado que si el sistema considerado tiene n dimensiones y el potencial de

modulación se expresa como una suma de cosenos, tales que cada uno pone en evidencia la inconmensuración según una dirección, entonces el sistema puede tener una transición metal-aislador para $\Delta\alpha=2$. que sea independiente de Q y de la posición del nivel de Fermi. El resultado es independiente de que el sistema tenga una o más direcciones inconmensuradas.

b) Un sistema bidimensional con inconmensuración según una sola dirección y tal que sus ristras estén en antifase no puede presentar una transición metal-aislador al estilo a) porque no es autodual.

c) Para obtener una idea somera de la localización en estos sistemas no se necesita más que diagonalizar matrices relativamente pequeñas, obteniéndose de esta forma resultados cualitativamente correctos.

d) Por medio del método de la matriz transferencia hemos podido calcular el coeficiente de Lyapunov (inversa de la longitud de localización) para sistemas de 2 y 3 ristras a lo largo de toda la banda de energías y en $E=0$ para 2, 3, 4, 5 y 6 ristras, con bajo costo de computación. Los sistemas con dos y tres ristras en fase presentan una transición metal-aislador entre $\Delta\alpha=1.9$ y 2.1 .

Del mismo modo como lo habíamos hecho para el caso unidimensional, hemos comprobado que también para las cintas el coeficiente $\gamma(E)$ calculado por el método de la matriz transferencia usado en combinación con histogramas de la densidad de estados constituye una herramienta sumamente útil para estudiar la localización. A partir de los resultados obtenidos se pueden sacar conclusiones sobre el comportamiento de los sistemas bidimensionales.

e) Para el modelo en antifase de dos y tres ristras hemos obtenido un resultado no previsto: el centro de la banda se localiza antes que los extremos. En general los sistemas se localizan comenzando por los extremos de banda, de manera que éste es totalmente atípico, dado que es el único que conocemos que presenta esta peculiaridad. Los sistemas con dos y tres ristras presentan el mismo comportamiento, salvo que, el que tiene tres ristras, presenta un estado en $E=0$ (en realidad una bandita en los alrededores de $E=0$) y el otro no.

Hemos comprobado que el estado que se encuentra en $E=0$ se localiza para $\Delta\alpha=2.$, o sea para la misma relación de parámetros, que produce la transición metal-aislador en los sistemas en fase. Esto lo hemos comprobado también para 5 ristras.

f) En el capítulo anterior habíamos mostrado que la introducción de la segunda dimensión modifica sustancialmente la forma de la densidad de estados de los sistemas en fase aún para valores muy pequeños de β_1 . Contrastando con esto, vemos en este capítulo, que las propiedades de localización parecen no modificarse, aún cuando tenemos la impresión de que las bandas de estados extendidos ($\Delta\alpha \ll 2.$) se tornan más angostas al aumentar el número de ristras en fase. Por otro lado, la densidad de estados de los sistemas en antifase presentaba estructura de gaps para valores más grandes de β_1 que en el problema en fase. Sin embargo, este sistema presenta un comportamiento totalmente distinto del que presenta el sistema unidimensional en lo que atañe a localización.

g) Es interesante hacer notar que desde el punto de vista de la longitud de localización, para $E=0$ no existen diferencias entre el modelo unidimensional y los modelos en fase y antifase para número impar de ristras y probablemente para $n \rightarrow \infty$ tampoco existirán diferencias para un número par de ristras.

CAPITULO IX

Resumen y conclusiones

El objetivo de este trabajo ha sido contribuir a la investigación de las propiedades de los sistemas inconmensurados. A juzgar por la cantidad de trabajos teóricos y experimentales publicados sobre el tema en los últimos tiempos, en la naturaleza existen muchos ejemplos de este tipo de materiales, que hace pocos años parecían tan raros. Nuestra atención ha estado dirigida al estudio de las propiedades electrónicas de estos sistemas: cálculo de densidad de estados y localización de las funciones de onda. Para ésto utilizamos algunos modelos inconmensurados unidimensionales y bidimensionales.

En un material cristalino, los átomos forman un arreglo ordenado, que se obtiene repitiendo la celda unidad del mismo en las tres direcciones del espacio. Cada átomo particular de la celda unidad tiene exactamente las mismas propiedades físicas en todas las celdas unidad del cristal. En los inconmensurados existe alguna propiedad, modulada en el espacio, que difiere de átomo en átomo. Esta modulación es periódica, pero con un período inconmensurado con el de la red subyacente (el cociente entre ambos períodos es un número irracional). Como consecuencia no hay simetría translacional y debido a ésto no se pueden aplicar los métodos usuales de Teoría de Sólidos y se han debido desarrollar otras teorías nuevas. Estos materiales presentan además, características peculiares, como presencia de ondas de densidad de carga, de solitones, etc, que los han convertido en objeto de intenso estudio experimental.

En esta tesis hemos hecho cálculos para distintos modelos inconmensurados, en los cuales la inconmensuración se manifiesta a través de los elementos diagonales del Hamiltoniano de uniones

fuertes. En todos los casos hemos tenido en cuenta sólo la interacción entre primeros vecinos. Los dos nuevos modelos introducidos se caracterizan por poseer una distribución uniforme de sus autoenergías de sitio, tratándose en un caso de una modulación zigzag y en el otro de un diente de sierra. En el Capítulo II hemos calculado la densidad de estados de estos sistemas, utilizando el método que cuenta los autovalores menores que una cierta energía dada⁽³⁸⁾, comprobando que la misma depende fuertemente de la forma funcional de las autoenergías de sitio. Sin embargo, la distribución de estados en bandas y minibandas de estos sistemas obedece la misma regla, igual a la del modelo con modulación coseno de las autoenergías de sitio que ha sido profusamente estudiado por otros autores.

En el Capítulo III hemos introducido desorden en los modelos inconmensurados unidimensionales mencionados. El propósito de introducir el desorden, fue "medir" el apartamiento de nuestros modelos con respecto al modelo completamente desordenado de Anderson, que posee la misma distribución uniforme de sus autoenergías de sitio. Hemos analizado este apartamiento en función del modelo, grado de inconmensuración, amplitud de la modulación de las autoenergías de sitio y tipo de desorden introducido. Llegamos a la conclusión de que el modelo diente de sierra, que presenta discontinuidades en las energías de sitio, está más cerca del modelo completamente desordenado que el modelo zigzag, que no presenta discontinuidades.

Hemos usado dos variantes de desorden: en un caso afecta uniformemente a todos los átomos y en el segundo afecta aleatoriamente a una porción "x" de átomos del sistema. Esta última forma de desorden es más brusca y los sistemas tienden con más rapidez al modelo de Anderson, en función del grado de desorden, x. El desorden uniforme mantiene una mayor correlación entre las autoenergías de sitio.

En el Capítulo IV hemos calculado la densidad de estados para sistemas que presentan solitones (disconmensuraciones o

paredes de dominio) Los solitones aparecen cuando el sistema está cerca de la transición conmensurado-inconmensurado, es decir cuando el período de la fase modulada se conmensura con el de la red subyacente. La densidad de estados de estos sistemas posee una estructura que consiste en bandas y minibandas distribuidas asimétricamente a lo ancho de la banda de energías y que tiende progresivamente al tipo de estructuras obtenidas en el Capítulo II a medida que la intensidad del potencial externo, U_a , disminuye alejándose de su valor crítico U_a^c .

Hemos calculado en el Capítulo V el coeficiente de localización exponencial, $\gamma(E)$, para los modelos unidimensionales introducidos en el Capítulo II, utilizando el método de la matriz transferencia⁽⁵⁰⁾. Usando $\gamma(E)$ en combinación con los histogramas de la densidad de estados, hemos obtenido las propiedades de localización de estos sistemas, mostrando que las mismas son fuertemente dependientes del tipo de modulación. Tanto en el caso de la modulación zigzag, como de la diente de sierra existen bordes de movilidad. Los bordes de movilidad en el problema con modulación zigzag separan zonas en las cuales los estados extendidos forman un espectro denso de otras en donde todos los estados son localizados. En el caso del Hamiltoniano con modulación diente de sierra, los bordes de movilidad separan regiones en las cuales todos los estados son localizados de zonas en donde, aparentemente, tanto los estados localizados como los extendidos pueblan densamente el espectro. En el Capítulo VI hemos hecho lo mismo para sistemas que presentan solitones. Estos sistemas también presentan un borde de movilidad, con estados extendidos para energías mayores y localizados para energías menores que el borde de movilidad. Este modelo parece comportarse como mejor conductor cuanto más asimétrica es la densidad de estados. Hemos calculado la distribución de carga en estos sistemas y comprobado que las dislocaciones actúan como atractoras de carga negativa, corroborándose los resultados obtenidos por Su y Schrieffer para otro modelo con solitones.

En el Capítulo VII, hemos calculado la densidad de estados para modelos inconmensurados bidimensionales, principalmente para sistemas en los cuales la inconmensuración es según una sola dirección. La modulación en todos los casos la hemos tomado cosenoidal. Hemos observado que las características de $n(E)$ dependen de que las cadenas de átomos en la dirección de la inconmensuración se encuentren todas en fase o en antifase entre sí. Existe un rasgo de los inconmensurados según una sola dirección que no parece depender de la dimensionalidad ni del modelo elegido: el número de estados que se encuentran en la banda central de $n(E)$, obedece en todos los casos la misma regla.

El Capítulo VIII lo hemos dedicado a investigar las propiedades de localización de los modelos bidimensionales introducidos. Hemos mostrado que el modelo con sus ristras en antifase no es autodual y por lo tanto no puede presentar una transición metal-aislador del tipo de la que presenta el modelo de Aubry⁽¹⁷⁾. Hemos calculado por medio del método de la matriz transferencia la inversa de la longitud de localización en $E=0$ para 2,3,4,5 y 6 ristras en fase y en antifase. Encontramos que para $E=0$ el comportamiento de estos sistemas con un número impar de ristras no difiere del modelo unidimensional con modulación tipo coseno. En cambio si uno calcula $\gamma(E)$ a lo ancho de toda la banda para dos y tres ristras, para modelos en fase y antifase, se encuentra con que el modelo en antifase se localiza a partir del centro de la banda y hacia los bordes. Esto no sucede para las ristras en fase que presentan un comportamiento similar al unidimensional, aunque el ancho de las bandas de estados extendidos ha disminuido. Vemos, entonces, que a pesar de que la introducción de la segunda dimensión modifica mucho la densidad de estados, la longitud de localización no se modifica. Esto se ve al aumentar el número (impar) de ristras y todo hace suponer que al aumentar mucho el número de ristras el comportamiento será el mismo para un número par de ellas.

De nuestros cálculos podemos inferir el comportamiento en $E=0$ de los sistemas bidimensionales. Fuera de $E=0$ es más difícil extrapolar los resultados obtenidos con 2 y 3 ristras.

Como una última conclusión podemos decir que el método de la matriz transferencia en combinación con histogramas de la densidad de estados, obtenidos por el método de Dean constituyen una herramienta adecuada y de bajo costo computacional para estudiar las características de sistemas de cualquier número de dimensiones pero inconmensurados según una sola dirección.

APENDICE I

Deducción de la ecuación de Harper

En este apéndice deduciremos la ecuación de autovalores para un electrón de conducción en una red bidimensional con un campo magnético perpendicular a la misma, en la aproximación en la cual se desprecia la interacción entre bandas.

Supongamos que tenemos una red cuadrada bidimensional con constante de red igual a "a". El sistema, como dijimos, está inmerso en un campo magnético uniforme \vec{H} , perpendicular al mismo. Consideraremos una sola banda cuya energía para el sistema sin campo magnético, dentro de la aproximación de uniones fuertes tiene la siguiente forma:

$$E(\vec{k}) = 2E_0(\cos k_x a + \cos k_y a) \quad (A1.1)$$

Para tener en cuenta la influencia del campo magnético introducimos, ahora, en (A1.1) la llamada sustitución de Peierls^(15,16), que consiste en reemplazar $(h/2\pi)\vec{k}$ por el operador $\vec{p} - e\vec{A}/c$, donde \vec{A} es el vector potencial. De esta manera transformamos $E(\vec{k})$ en un operador que se puede tratar como un Hamiltoniano efectivo^(15,16) en la ecuación:

$$E(\vec{k}) \Psi(\vec{r}) = W \Psi(\vec{r}) \quad (A1.2)$$

Una medida conveniente para \vec{A} es $\vec{A} = (0, Hx, 0)$, de tal manera que \vec{H} está dirigido según z ⁽¹⁶⁾.

Haciendo la sustitución mencionada obtenemos:

$$\begin{aligned}
 & E_0 (e^{ik_x a} + e^{-ik_x a} + e^{ik_y a} + e^{-ik_y a}) \Psi(x, y) \\
 & = E_0 (e^{(i2\pi/h)p_x a} + e^{-(i2\pi/h)p_x a} + \\
 & + e^{(i2\pi/h)p_y a} e^{-(ie2\pi/hc) H x a} + \\
 & + e^{-(i2\pi/h)p_y a} e^{(ie2\pi/hc) H x a}) \Psi(x, y) = W \Psi(x, y)
 \end{aligned}
 \tag{A1.3}$$

Vemos en A1.3 que el Hamiltoniano efectivo contiene operadores de translación $\exp(ap_x 2\pi/h)$ y $\exp(ap_y 2\pi/h)$. Teniendo en cuenta ésto obtenemos:

$$\begin{aligned}
 & E_0 [\Psi(x+a, y) + \Psi(x-a, y) + e^{-(i2\pi e/ch) H x a} * \\
 & * \Psi(x, y+a) + e^{i(e2\pi/ch) H x a} \Psi(x, y-a)] = W \Psi(x, y)
 \end{aligned}
 \tag{A1.4}$$

Si sustituimos:

$$x = ma \quad y = na \quad W/E_0 = \epsilon \tag{A1.5}$$

y si, además, dado que los coeficientes en A1.4 sólo involucran a x, consideramos un comportamiento de ondas planas en la dirección "y", o sea si escribimos:

$$\Psi(ma, na) = e^{i v n} g(m) \tag{A1.6}$$

y si introducimos el parámetro $\alpha = a^2 H / (hc/e)$, obtenemos:

$$g(m+1) + g(m-1) + 2\cos(2\pi m \alpha - v) g(m) = \epsilon g(m) \tag{A1.7}$$

A1.7 es igual a la ecuación (1.1) pero con $\Delta\alpha=2$.

APENDICE II

Método de Dean o de recuento de autovalores

Este método permite calcular el número de autovalores menores que un cierto valor real λ , que posee una matriz A real y simétrica.

En este apéndice expondremos el método para matrices tridiagonales, dado que toda matriz real y simétrica puede ser tridionalizada.

Sea A la siguiente matriz tridiagonal:

$$A = \begin{bmatrix} a_1 & b_2 & & & & & \\ b_2 & a_2 & b_3 & & & & \\ & b_3 & a_3 & b_4 & & & \\ & & & \cdot & \cdot & \cdot & \\ & & & & \cdot & \cdot & b_n \\ & & & & & b_n & a_n \end{bmatrix} \quad (A2.1)$$

Los polinomios característicos de los menores principales de esta matriz se pueden calcular de manera recurrente y son de la siguiente forma:

$$\begin{aligned} p_0(\lambda) &= 1. \\ p_1(\lambda) &= a_1 - \lambda \\ p_2(\lambda) &= (a_2 - \lambda)p_1(\lambda) - b_2^2 p_0(\lambda) \\ &\vdots \\ p_i(\lambda) &= (a_i - \lambda)p_{i-1}(\lambda) - b_i^2 p_{i-2}(\lambda) \end{aligned} \quad \begin{matrix} \\ \\ \\ \\ \\ i=1, \dots, n \end{matrix} \quad (A2.2)$$

Estos polinomios tienen las siguientes propiedades:

- 1) $P_i(\lambda)$ es un polinomio de grado i
- 2) $P_i(\lambda) \rightarrow +\infty$ si $\lambda \rightarrow -\infty$
- 3) $P_i(\lambda) \rightarrow +\infty(-1)^i$ si $\lambda \rightarrow +\infty$
- 4) $P_i(\mu)P_{i-2}(\mu) \neq 0$ si $P_{i-1}(\mu)=0$ (A2.3)

Las propiedades 1), 2) y 3) son obvias y de la expresión para $P_i(\lambda)$ surge que:

$$P_i(\mu) = -b_i^2 P_{i-2}(\mu) \quad \text{si } P_{i-1}(\mu)=0 \quad (\text{A2.4})$$

es decir:

$$P_i(\mu)P_{i-2}(\mu) = -b_i^2 (P_{i-2}(\mu))^2 \neq 0 \quad (\text{A2.5})$$

A2.5 no puede ser igual a cero, porque de ser así, $P_{i-2}(\mu)$ sería cero y de A2.2 resultaría que todos los $P_i(\mu)$ serían cero incluyendo a $P_0(\mu)$, que por definición vale 1.

Teniendo en cuenta las propiedades A2.3 se demuestra por inducción que los ceros de P_i son simples y que están separados por los ceros de P_{i-1} . Que estas raíces son reales se infiere directamente del hecho de que los P_i son los polinomios característicos de matrices hermiticas.

El esquema de signos de los P_i será entonces:

P_0				+		.
P_1			+		-	.
P_2		+		-		+
P_3	+		-		+	+
					.	
					λ	

etc

De lo expuesto y del esquema de signos para los P_i , se infiere que el número de autovalores de A , que son los ceros de P_n , menores que λ viene dado por el número de cambios de signo, descontando los ceros, de la secuencia $P_i(\lambda)$. Por ejemplo, suponiendo que la matriz A es de dimensión 3, y que queremos averiguar cuántos autovalores menores que λ posee, del esquema de signos surge que la secuencia $P_0(\lambda)$, $P_1(\lambda)$, $P_2(\lambda)$ sufre dos cambios de signo (en λ , P_0 es positivo, P_1 es negativo y P_2 es positivo) y efectivamente si nos fijamos en el esquema de signos para P_3 , vemos que tiene dos raíces menores que λ .

Para calcular histogramas de la densidad de estados de un sistema cuya matriz del Hamiltoniano es tridiagonal, se usan las fórmulas recurrentes A(2.2). El número de estados entre λ_j y $\lambda_j + \Delta\lambda$ viene dado por el número de cambios de signo de la secuencia $P_i(\lambda_j + \Delta\lambda)$ menos el número de cambios de signo de la secuencia $P_i(\lambda_j)$.

Dado que el método no trabaja con matrices, para calcular histogramas de la densidad de estados de sistemas unidimensionales se pueden usar cadenas muy largas (nosotros hemos usado hasta 10000 átomos) con bajo costo computacional. Los cálculos se hacen más costosos cuando los sistemas no son unidimensionales y la matriz del Hamiltoniano no es tridiagonal, en este caso lo que encarece el cómputo es la tridiagonalización, aún así el costo de calcular un histograma es siempre mucho menor que el de diagonalizar matrices.

REFERENCIAS

- 1) J.C. Marneggi, A. Delapalme, G.H. Lander, C. Vettier and Lehner, Solid St. Commun. 43(1982), 577
- 2) T. Rasing. Tesis Doctoral, Universidad Católica de Nijmegen, 1982.
A. Janner, Th. Rasing, P. Bennema and W.v.d. Linden, Phys Rev Lett. 45(1980), 1700
- 3) B.D. Cutforth, W.R. Datars, A. van Schyndel and R.J. Gillespie, Solid St. Commun. 21(1977), 377
- 4) J.M. Williams and A. Schultz.
International Conference on Modulated Structures. Kailua-Kona, HI, USA. Marzo 1979, pág. 377
- 5) R.E. Peierls, Quantum Theory of Solids (Clarendon, Oxford, 1955) Capítulo VII.
- 6) H. Froelich, Proc. Royal Soc. of London 223(1954), 296
- 7) F.C. Frank and J.H. van der Merwe, Proc. Royal Soc. of London 198(1949), 205
- 8) T. Rice and G. Theodorou, Phys Rev B 18(1978), 2840
- 9) S.C. Ying, Phys Rev B 3(1971), 4160
- 10) P.M. de Wolff, Acta Crystallografica, Sec A 30(1974), 777
- 11) A. Janner and T. Janssen, Phys Rev B 15(1977), 643
- 12) A. Janner, T. Janssen and P.M. de Wolff, International Conference on Modulated Structures, Kailua-Kona, HI, USA, Marzo 1979, pág. 81

- 13) C. de Lange and T. Janssen, J. Phys C 14(1981), 5269
- 14) Ibid. Phys Rev B 28 (1983) 195
- 15) P.G. Harper, Proc. Royal Soc. of London, A 68(1955), 8741
- 16) D.R. Hofstadter, Phys Rev B 14(1976), 2239
- 17) G. André and S. Aubry, Annals Israel. Phys. Soc., 3(1980), 133
- 18) E.I. Dinaburg and Ya Sinai, Funct. Anal. i Pril, 9(4) (1975), 8
- 19) J.B. Sokoloff, Solid St. Commun., 40(1981), 633
- 20) Ibid, Phys Rev B, 22(1980), 5823
- 21) Ibid, Phys Rev B, 23(1981), 6422
- 22) J. Bellissard, A. Formoso, R. Lima and D. Testard, Phys Rev B, 26(1982), 3024
- 23) K.S. Dy and T.S. Ma, J. Phys. C, 15(1982), 6971
- 24) M. Azbel, Sov. Phys. JETP 19(1964), 634
- 25) B. Simon, Adv. Appl. Mathematics 3(1982), 463
- 26) C. Soukoulis and E. Economou, Phys Rev Lett. 48(1982), 1043
- 27) J.B. Sokoloff, Phys Rev B 25(1982), 5901
- 28) T. Hogg y B.A. Huberman, comunicación privada.
- 29) J.B. Sokoloff and J.V. José, Phys Rev Lett. 49(1982), 334

- 30) Ibid, Phys Rev Lett. 49(1982) 700
- 31) M. Kohomoto, Phys Rev Lett. 51(1983), 1198
- 32) R.E. Prange, D.R. Grempel and S. Fishman, Phys Rev B 29(1984) 6500
- 33) Ibid, Phys Rev B 28(1983), 7370
- 34) A.M. Llois, M. Weissman and N.V. Cohan, Phys Rev B 27(1983), 7379
- 35) Rey Pastor, Pi Calleja y C. A. Trejo, Análisis Matemático, Vol I, Cap V, Anexo III. Editorial Kapelusz 1961.
- 36) F. Delyon and B. Souillard, Commun. Math. Phys. 89(1983), 415
- 37) B. Souillard, Physics Reports 103(1984), 41
- 38) P. Dean, Rev Mod Phys 44(1972), 127
- 39) I.D. Brown, B.D. Cutforth, C.G. Davies, R.J. Gillespie, P.R. Ireland and J.E. Verkris, Canad. Journal Chem. 52 (1974), 791
- 40) E. Ehrenfreund, P.R. Newman, A.J. Heeger, N.D. Miro and A.G. MacDiarmid, Phys Rev B 16(1977), 1781
- 41) C.K. Chiang, R. Spal, A. Denenstein, A.J. Heeger, N.D. Miro and A.G. MacDiarmid, Solid St. Commun. 22(1977), 293
- 42) R. Spal, C.K. Chiang, A. Denenstein, A.J. Heeger, M.D. Miro and A.G. MacDiarmid, Phys Rev Lett. 39(1977), 650
- 43) R. Spal, C.E. Chen, A. Denenstein, A.R. McGhie, A.J. Heeger and A.G. MacDiarmid, Solid St. Commun 32(1979), 641

- 44) V.J. Emery and J.D. Axe, Phys Rev Lett. 40(1978), 1507
- 45) J.M. Ziman, Models of Disorder, Cambridge University Press (1979) Cap 9.
- 46) H. Aoki, J. Phys C 17(1984), 1885
- 47) I.M. Suslov, Zh. Eksp. Teor. Fiz. 83(1982), 1079
- 48) M. Kohmoto, L. Kadanoff and C. Tang, Phys Rev Lett. 50 (1983), 1870
- 49) A.M. Llois, N.V. Cohan and M. Weissmann, Phys Rev B 29 (1984), 3111
- 50) K. Ishii, Supp. Prog. Theor. Phys. 53(1973), 77
- 51) J.L. Pichard, Tesis Doctoral, Universidad de Paris-Sud, Centro de Orsay, 1984
- 52) R.E. Borland, Proc. Royal Soc. A274(1963), 529
- 53) H. Matsuda and K. Ishii, Supp. Prog. Theor. Phys. 45 (1970), 56
- 54) W.P. Su and J.R. Schrieffer, Phys Rev Lett. 46(1981), 738
- 55) W.P. Su, J.R. Schrieffer and A.J. Heeger, Phys Rev Lett. 42(1979), 1698
- 56) W.P. Su, J.R. Schrieffer and A.J. Heeger, Phys Rev B 22 (1980), 2099
- 57) D.J. Thouless, J. Phys. C 5(1972), 77
- 58) J.L. Pichard and G. Sarma, J. Phys. C 14(1981), L127

- 59) J.L. Pichard and G. Sarma, J. Phys. C 14(1981), L617
- 60) A. Mackinnon and B. Kramer, Phys Rev Lett. 47(1981), 1546
- 61) H.M. Pastawski, J.F. Weisz and S. Albornoz, Phys Rev B 28
(1983), 6896
- 62) A. Mackinnon, B. Kramer, Z. Phys. B 53(1983), 1
- 63) T. Nagashima and I. Shimada, Prog. Theor. Phys 61(1979),
1605
- 64) V.I. Oseledec, Trans. Moscow Math Soc 19(1968), 197
- 65) R.J. Bell and P. Dean, Discussions of the Faraday Soc. 50
(1970), 55
- 66) J.F. Weisz and H.M. Pastawski, Phys. Lett. A, en prensa
- 67) H.M. Pastawski, C.M. Slutzky, J.F. Weisz, comunicación
privada

Ina Pastawski

Deisz

INFORME SOBRE EL TRABAJO DE TESIS DE LA LICENCIADA ANA MARIA LLOIS

La Lic. Ana María Llois es actualmente becaria de perfeccionamiento del Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET). Su lugar de trabajo es la División Física del Sólido de la Comisión Nacional de Energía Atómica. Antes de comenzar este trabajo de tesis sobre los materiales inconmensurados, realizó otros trabajos de investigación en el mismo grupo sobre propiedades electrónicas de materiales desordenados. Estos trabajos han sido publicados en buenas revistas internacionales de física.

El estudio de las propiedades de sólidos inconmensurados lo comenzó en 1982, bajo la dirección conjunta de la Dra. Norah Cohan y mía. Coincidió con el interés del grupo experimental de la división en estos materiales y con un enorme auge del tema en varias partes del mundo.

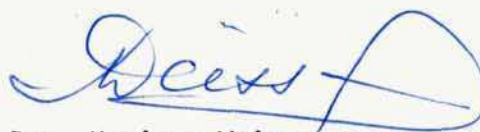
Para comenzar estudió las semejanzas y diferencias entre los materiales desordenados y aquellos sujetos a dos periodicidades inconmensuradas entre sí, es decir, con dos períodos cuyo cociente es un irracional.

Los primeros cálculos los hizo para sistemas unidimensionales, con la modulación en los elementos diagonales del Hamiltoniano de uniones fuertes (tight-binding). Posteriormente incluyó aproximaciones para sistemas de dos y tres dimensiones y también se ocupó de sistemas con solitones, ya que en el límite se reducen a los inconmensurables.

Las propiedades que calculó fueron las densidades de estados electrónicos y la localización de las funciones de onda. Las primeras presentan gaps y minigaps muy interesantes, que se relacionan con el desarrollo en fracciones continuas del número irracional que vincula los dos períodos. Las funciones de onda de estos sistemas no son todas localizadas como en los sistemas desordenados, sino que su forma depende mucho de la modulación.

Los primeros trabajos, sobre sistemas unidimensionales, han sido publicados en Physical Review B, lo cual avala su originalidad y buen nivel académico. Las extensiones a más dimensiones todavía no han sido presentadas para su publicación.

A mi juicio este trabajo es de gran actualidad, muy completo y revela buen manejo de variados métodos numéricos. Contribuye al conocimiento de materiales novedosos, cuyas propiedades experimentales están siendo estudiadas en muchos laboratorios de todas partes del mundo.



Dra. Mariana Weissmann